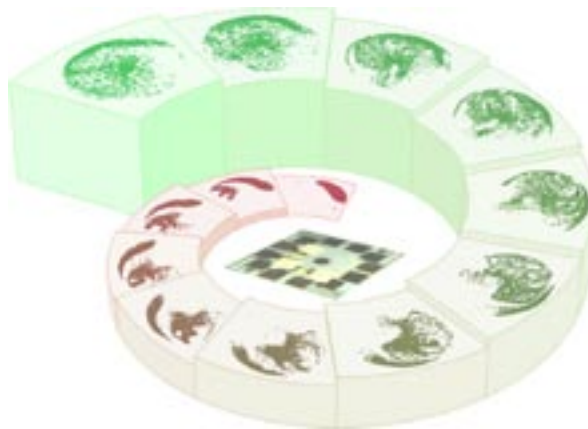


Mischen und Sortieren mit SAW-Fluidik in Simulation und Experiment

Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades der
mathematisch-naturwissenschaftlichen Fakultät der
Universität Augsburg
vorgelegt von
Thomas Frommelt
aus Westendorf



Lehrstuhl für Experimentalphysik I
Institut für Physik
Universität Augsburg
Januar 2007

Erster Gutachter:	Prof. Dr. Achim Wixforth
Zweiter Gutachter:	Prof. Dr. Thilo Kopp
Dritter Gutachter:	Prof. Dr. Karin Jacobs

Tag der Einreichung:	08. Januar 2007
Tag der mündlichen Prüfung:	09. März 2007

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Akustische Wellen im Festkörper	5
2.1	Die Grundgleichungen der Akustik	5
2.2	Akustische Volumenwellen	6
2.3	Auswirkungen der Anisotropie	7
2.4	Akustische Oberflächenwellen	8
2.5	Eigenschaften von LiNbO_3	10
2.6	Anregung von SAWs	11
2.7	Einheiten von Leistung und Dämpfung	13
2.8	Sensorik mit Verzögerungsleitungen	13
2.9	Dämpfung von Oberflächenwellen	15
2.10	Abschätzung der SAW-Amplituden	16
3	Versuchskomponenten und Präparation	17
3.1	Der Mikrofluidik-Versuchsaufbau	17
3.1.1	Cantilever-Pin-Probenhalter	17
3.1.2	HF-Generatoren	20
3.1.3	Zusätzliche HF-Geräte	20
3.1.4	Fluidik-Steuerung: Hardware	21
3.1.5	Fluidik-Steuerung: Software	23
3.1.6	Die Mikroskop-Einheit	25
3.1.7	Strömungsprofile und Particle-Tracking	25
3.2	Präparation von Mikrofluidik-Chips	26
3.2.1	Maskenherstellung	26
3.2.2	Chip-Design	29
3.2.3	Chip-Herstellung	30
4	SAW-Fluidik in drei Dimensionen	37
4.1	Theoretische Grundlagen der SAW-Fluidik	37
4.1.1	Anregung von Schallwellen im Wasser	37
4.1.2	Die Navier-Stokes-Gleichung	39
4.1.3	Eigenschaften der Mikrofluidik	39
4.1.4	Die schwache Formulierung	40

4.1.5	Aufwand der kompressiblen Simulation der 3d-SAW-Fluidik . . .	41
4.2	Experimente zur SAW-Fluidik	43
4.2.1	Geometrische Einflüsse	43
4.2.2	Zusammenhang zwischen Fluid-Geschwindigkeit und SAW-Leistung	46
4.2.3	1/e-Abklinglänge der Schallintensität im Wasser	50
4.2.4	1/e-Abklinglänge der SAW-Intensität	50
4.3	Raytracing-Ansatz	56
4.4	SAW-Raytracing-Simulation in 3d-Geometrien	58
4.4.1	Geometriebestimmung mit dem Surface Evolver	58
4.4.2	Berechnung des SAW-Schallpfad-Profiles	62
4.4.3	Die SAW-Raytracing-Anwendung	66
4.4.4	Simulation der Fluidik in COMSOL Multiphysics	70
4.5	Simulation ausgewählter Experimente	73
4.5.1	Katenoid-Reservoir mit Deckel und freiem Rand	73
4.5.2	Freier Tropfen	78
4.5.3	Kurven mit freien Oberflächen	81
4.6	Zusammenfassung	83
5	Mischen mit chaotischer Advektion	85
5.1	Theoretische Grundlagen	85
5.1.1	Mischen bei kleinen Reynolds-Zahlen	85
5.1.2	Die Péclet-Zahl	87
5.1.3	Chaotische Advektion	88
5.2	Realisierung der chaotischen Advektion	90
5.2.1	Aufbau und Steuerung des Mischer-Chips	90
5.2.2	Mischkonfigurationen	91
5.2.3	Simulation der Geschwindigkeitsfelder	94
5.2.4	Simulation der Advektion	96
5.2.5	Quantifizierung der Mischungsqualität	98
5.2.6	Vergleichbarkeit der Experimente	99
5.3	Ergebnisse zur chaotischen Advektion	100
5.3.1	Optimales Mischen im Dual-Modus	100
5.3.2	Chaotische Advektion mit einem Jet	103
5.4	Zusammenfassung	104
6	Sortieren in der SAW-Fluidik	107
6.1	Sortieren mit Dielektrophorese	107
6.1.1	Theoretische Grundlagen	107
6.1.2	Umleitung mit NDEP	109
6.1.3	Abscheidung mit PDEP	112
6.2	Teilchen-Akkumulation in Wirbeln	116
6.3	Zusammenfassung	119

7 Zusammenfassung und Ausblick	121
7.1 Die SAW-Raytracing-Simulation	121
7.2 Mischen mit chaotischer Advektion	123
7.3 Sortieren in der SAW-Fluidik	124
A Herleitungen und Beschreibungen	127
A.1 Dielektrische Oberflächenkonstante und spezifische Feldadmittanz	127
A.2 Parabolische Approximation der Schallgeschwindigkeit	129
A.3 Die Ladungsdichte einer Überlappung	130
A.4 Modellierung mit Punktquellen	132
A.5 Akustische Reflexionen an Grenzflächen	133
A.6 Qualitätsoptimierung von Gittern	134
A.7 Zusätzliche Informationen zum Surface Evolver	136
A.8 Fluoreszenzmikroskopie	140
A.9 Details zur Probenherstellung	141
A.9.1 Reinigung der Substrate (1)	142
A.9.2 Belackung für Fotolithografie (2)	142
A.9.3 Belichtung der Grundstrukturen (3)	142
A.9.4 Entwicklung des Lacks (4)	143
A.9.5 Belichtung der feinen Strukturen (5)	143
A.9.6 Metallisierung (6)	143
A.9.7 Lift-Off des Metalls (7)	144
A.9.8 Belichtung der Schutzschicht (8)	144
A.9.9 Aufdampfen der SiO-Schutzschicht (9)	144
A.9.10 Lift-Off der SiO-Schutzschicht (10)	144
A.9.11 Hydrophobe Silanisierung (11)	144
A.9.12 Lithografische Definition der Fluidik-Bahn (12)	145
A.9.13 Hydrophile Benetzungsmodulation (13)	145
A.9.14 Einsatz der Chips (14)	145
A.10 Herstellung von Fotofilmmasken	146
A.11 Vergleich approximierter Schallpfad-Profile	147
A.12 Fits der Histogramm-Peaks	148
B Verwendete Größen und Funktionen	149
B.1 Verwendete Zahlenwerte und Konfigurationen	149
B.2 Materialabhängige Tensorgrößen	150
B.3 Richtungsabhängige Größen auf LiNbO ₃	151
B.4 Literatur: Dämpfung von Schallwellen in Wasser	152
B.5 Probenfoto: gebondeter Chip	152
B.6 Modellierte Geschwindigkeitsfelder	153
B.7 Probenfotos	154
Danksagung	163

Abbildungsverzeichnis

2.1	Amplitudenverlauf im Material und Gitterverzerrung einer Rayleigh-Welle	9
2.2	Slowness-Kurve für LiNbO ₃ 128° rot Y-Cut, reine Moden und der Power-Flow-Angle	10
2.3	Aufbau von normalen und tapered IDTs	12
2.4	Aufbau einer Verzögerungsleitung zur Sensorik	14
2.5	Beugungsverluste einer Verzögerungsleitung	14
3.1	Prinzipskizze eines Pogo- und Cantilever-Pin-Aufbaus	18
3.2	CAD- und Platinen-Zeichnung, sowie Foto des Cantilever-Pin-Probenhalters	19
3.3	HF-Bauteile: Leistungsschalter und Richtkoppler	21
3.4	Hardware zur Steuerung der SAW-Fluidik	22
3.5	Software zur Steuerung der SAW-Fluidik	24
3.6	Strömungsprofile und Particle-Tracking	25
3.7	Maskenherstellung	27
3.8	Layoutverwaltung und Chip-Design	28
3.9	Chip-Herstellung (1)	30
3.10	Chip-Herstellung (2)	31
3.11	Chip-Herstellung (3)	32
3.12	Chip-Herstellung (4)	33
3.13	Chip-Herstellung (5)	35
4.1	Anregung von Longitudinalwellen in Wasser	38
4.2	Geometrische Einflüsse auf die Strömung	44
4.3	Messung des Zusammenhangs SAW-Leistung - Fluid-Geschwindigkeit .	46
4.4	Aufbereitung der Daten des Particle-Trackings (1)	47
4.5	Aufbereitung der Daten des Particle-Trackings (2)	48
4.6	Lineare Abhängigkeit der Fluid-Geschwindigkeit von der SAW-Leistung	49
4.7	Bestimmung der 1/e-Abklinglänge der SAW-Intensität: Prinzip	51
4.8	Typischer Signalverlauf der Transmissionsmessungen	52
4.9	Ausbreitung der Schallwellen im Wasser	53
4.10	Bestimmung der 1/e-Abklinglänge der SAW-Intensität: Ergebnisse . . .	55
4.11	Zerlegung von akustischen Wellenfronten für Raytracing	57

4.12	Anwendungen zur 3d-Simulation des Acoustic Streaming	58
4.13	Elementare Modellgenerierung im Surface Evolver (1)	59
4.14	Elementare Modellgenerierung im Surface Evolver (2)	60
4.15	Übersicht verschiedener IDT-Arten	64
4.16	Vorbereitungen für das Raytracing	67
4.17	Die SAW-Raytracing-Anwendung (1)	68
4.18	Die SAW-Raytracing-Anwendung (2)	69
4.19	Modell in COMSOL Multiphysics	71
4.20	Beispielsimulation	72
4.21	Fluidik im Katenoid: Prinzip	73
4.22	Simulationen im Katenoid (1)	75
4.23	Simulationen im Katenoid (2)	77
4.24	Fluidik im freien Tropfen	79
4.25	Fluidik in Kurven: Prinzip	80
4.26	Fluidik in Kurven: Simulationen	82
4.27	Auswirkungen des Acoustic Streaming-Volumenkraftfelds auf die Bead- bewegung	83
5.1	Klassifizierung mikrofluidischer Systeme	87
5.2	Mischen mit blinkenden Wirbeln: Prinzip	89
5.3	Mischen mit zeitlich modulierten Strömungsprofilen: Aufbau	90
5.4	2d-Simulation der chaotischen Advektion: Prinzip	95
5.5	2d-Simulation der chaotischen Advektion: Vergleich mit Experiment	97
5.6	Optimales Mischen im Dual-Modus: Ergebnisse	101
5.7	Mischindikator ICV: Vergleich von Experiment und Simulation im Dual- Modus	102
5.8	Vergleich zwischen Schwenk-Modus und Mono-Modus: Experiment und Simulation	103
5.9	Mischindikator ICV: Vergleich zwischen Schwenk-Modus und Mono-Modus	104
6.1	Umleitung mit NDEP: Prinzip	109
6.2	Umleitung mit NDEP: Ergebnisse	110
6.3	SWNT-Anlagerung mit PDEP: Prinzip	113
6.4	SWNT-Anlagerung mit PDEP: Ergebnisse	115
6.5	Teilchen-Akkumulation in Wirbeln: Prinzip	116
6.6	Teilchen-Akkumulation in Wirbeln: Ergebnisse (1)	117
6.7	Teilchen-Akkumulation in Wirbeln: Ergebnisse (2)	118
7.1	Hochgeschwindigkeitsfluidik	122
7.2	Mischerkonzept für ein Katenoid-förmiges Fluid-Reservoir	124
A.1	Spezifische Feldadmittanz von LiNbO_3	128
A.2	Parabolische Approximation der Schallgeschwindigkeit	129
A.3	Oberflächenladungsdichte auf einem IDT	131

A.4	Vergleich von überlappungs- und punktquellenbasierter Modellierung	133
A.5	Qualitätsoptimierung von Gittern	135
A.6	Fortgeschrittene Modellgenerierung im Surface Evolver	140
A.7	Funktionsweise eines Fluoreszenzmikroskops	141
A.8	Konfiguration der Belichtungsanlage	147
A.9	Vergleich approximierter Schallpfad-Profile	147
A.10	Gauß-Fits der q_u -Histogramme nach Kapitel 4.2.2	148
B.1	Temperaturabhängigkeit der Viskosität	149
B.2	Richtungsabhängige Größen von LiNbO_3	151
B.3	Probenfoto: gebondeter Chip	152
B.4	Modellierte Geschwindigkeitsfelder	153
B.5	Probenfotos	154

Kapitel 1

Einleitung

Am 29. Dezember 1959 versuchte Richard Feynman in seinem Vortrag „There’s plenty of room at the bottom“ [Feynman59] seinen Zuhörern einen Eindruck zu vermitteln, welche Möglichkeiten sich durch die Miniaturisierung von Bauteilen ergeben würden. Im Jahre 1965 prophezeite Gordon Moore [Moore65], dass sich alle 18 Monate die Anzahl an Transistoren auf integrierten Schaltkreisen verdoppeln sollte. Die Mikroelektronik hat so in den letzten vierzig Jahren einen rasanten Fortschritt erfahren, dessen Vorzüge wir heute genießen. Im Gegensatz dazu erlebt die Entwicklung mechanischer Mikrobeauteile (MEMS) erst seit Mitte der achtziger Jahre einen signifikanten Aufschwung.

Eine Strömungsrichtung innerhalb der MEMS-Forschung ist die Entwicklung sogenannter Labs-on-a-chip bzw. μ TAS (Micro total analysis systems). Die Idee der Miniaturisierung von Laborfunktionen auf Chipgröße birgt enorme Vorteile. Die Platzersparnis ermöglicht eine parallele Nutzung einer Vielzahl solcher Einheiten, wodurch der Durchsatz erheblich erhöht wird. Des weiteren eröffnet sie die Möglichkeit, tragbare Diagnostik für Ärzte zu entwickeln. Geringste Probenmengen müssen nicht erst auf Labormaßstab amplifiziert werden, sondern können vor Ort verarbeitet werden. Die Automatisierung minimiert den Kontakt zur Umwelt, wodurch Kontamination der Proben, aber auch der Umgebung durch die Proben praktisch entfällt. Kleine Probenvolumina können mit weniger Energie schneller und präziser geheizt und gekühlt werden. So verwendet die Pharmaindustrie für ihre unzähligen Versuche beim „drug screening“ schon lange Mikrotiterplatten, die aus bis zu 1536 Kammern bestehen und durch die winzigen Versuchsgefäße zusätzlich enormes Einsparungspotential bei den Reagenzien bieten.

Die Natur zeigt jedoch, dass die Mikrowelt auch einige Überraschungen bereit hält, die teilweise neuer Konzepte bedürfen. Eine Technik zur Bewegung von Flüssigkeiten auf Sub-Millimeter-Skala muss spezielle Anforderungen erfüllen: Da die Flüssigkeitsmengen gängigerweise im Bereich Nanoliter bis wenige Mikroliter angesiedelt sind, darf ein Pumpsystem kein Totvolumen haben. Nimmt man außerdem an, dass die Leistungsdichte eines mechanischen Antriebs konstant ist, so wird die Leistung eines Bauteils durch die Miniaturisierung kubisch verringert. Gleichzeitig skaliert aber das Verhältnis

von Oberfläche und Volumen nur linear mit der Ausdehnung. Dieser drastische Einfluss der Oberflächen und damit der viskosen Kräfte kann somit nicht durch integrierte mechanische Mikroantriebe auf dem Chip kompensiert werden. Die Verwendung leistungsfähiger externer mechanischer Antriebe gibt aber durch die Notwendigkeit von Anschlüssen ein unteres Limit der Miniaturisierung vor. Deshalb wurde bereits Mitte der 90er Jahre begonnen nach alternativen nicht-mechanischen Antrieben zu forschen, die auf dem Chip implementiert werden können [Nguyen02]. Anstatt durch bewegliche Bauteile oder mechanische Komponenten wird eine Strömung durch elektrokinetisches Pumpen [Fuhr94], elektromagnetische Kräfte [Hatch01], Elektromodulation der Benetzungseigenschaften [Gong04] oder Ultraschall [Kaajakari01] erzeugt. Letzteres ist eine Form des akustisch induzierten Flusses (*Acoustic Streaming*), erzeugt durch eine piezoelektrische Platte, die mit einer elektrischen Wechselspannung zu Schwingungen angeregt wird. All diese Konzepte besitzen jedoch einen komplexen dreidimensionalen Aufbau und sind somit nicht preiswert herzustellen. Dieses Kriterium ist für die Verwendung auf Einweg-Chips oder in großen Stückzahlen unerlässlich.

An dieser Stelle setzt eine Technologie an, die ebenfalls auf dem Effekt des Acoustic Streaming basiert. Auf einem piezoelektrischen Substrat, z.B. LiNbO_3 , kann mit Hilfe eines interdigitalen Transducers (*IDT*) eine Oberflächenwelle (*surface acoustic wave*, *SAW*) erzeugt werden [White65], wie sie von Lord Rayleigh 1885 theoretisch beschrieben wurde [Rayleigh85]. Typischerweise kennt man solche Rayleigh-Wellen in der makroskopischen Welt als Erdbeben. Wird auf das Substrat nun eine Flüssigkeit abgesetzt, so wird diese periodisch an der Grenzfläche Flüssigkeit-Substrat durch die SAW angeregt. Die entstehende Schallwelle in der Flüssigkeit erzeugt ebenfalls Acoustic Streaming, das zum Transport innerhalb der Flüssigkeit, aber auch des Fluidvolumens selbst verwendet werden kann. Vorteilhaft ist hierbei, dass IDTs mit herkömmlicher Planartechnologie bereits kostengünstig in Massenproduktion hergestellt werden, um sie als Filter in Handys oder Videorekordern einzusetzen. Damit kann man im Bereich IDT-Design und Substrateigenschaften auf einen ausgeprägten Fundus an Informationen zurückgreifen. Die SAW ist somit eine nicht-invasive on-chip Antriebstechnologie, die durch Bedampfung des Chips mit SiO oder SiO_2 auch für die Biotechnologie geeignete Oberflächen bietet.

Seit dem Entwicklungsbeginn im Jahr 2000 [Rathgeber00] wurde eine beeindruckende Palette von Anwendungen erschlossen. Neben Mikrofluidikprozessoren zur gezielten Manipulation von Nanoliter-Tröpfchen ([Wixforth02, Wixforth04A, Wixforth04B] und [Strobl02]) und Mischen in Kanalstrukturen [Sritharan06] sowie Mikrotiterplatten [Rathgeber05] wurde die Ausrichtung von Kohlenstoff-Nanoröhren [Strobl04] und on-chip PCR [Guttenberg05] verwirklicht (nähere Informationen unter www.advalytix.de).

Die vorliegende Arbeit führt diese Entwicklungen auf theoretischer und experimenteller Ebene fort. Dazu wird in Kapitel 2 eine kurze Einführung zur Theorie akustischer Wellen im Festkörper gegeben. In Kapitel 3 stellen wir den Cantilever-Pin-Probenhalter vor, auf dem unsere Mikrofluidik-Chips temperaturgeregelt und frei zugänglich unter dem Auflichtmikroskop betrieben werden können. Die Anzahl an Signalzuführungen

wurde dabei maximiert, um auch komplexe elektrokinetische Experimente zu ermöglichen. Ferner werden weitere Elemente wie die Steuerungssoftware zur Ausführung benutzerdefinierter Mikrofluidik-Programme und die Design-Anwendungen zur Herstellung von SAW-Mikrofluidik-Chips beschrieben.

In Kapitel 4 erörtern wir die SAW-Fluidik als theoretisch anspruchsvolles und interessantes Multiskalenproblem: Die Periodendauer der Schallwelle beträgt etwa 10^{-8} s, das Acoustic Streaming ist hingegen ein zeitgemittelter Fluidik-Effekt. Auch die Längenskalen unterscheiden sich enorm. So bewegt sich die SAW-Amplitude zwischen 10^{-10} m und 10^{-9} m, die Wellenlänge ist etwa 10^{-5} m und die Ausdehnung der Flüssigkeit erreicht bis zu 10^{-3} m. Diese Problematik führt die aktuelle Simulationstechnik an ihre Grenzen. Wir legen dar, dass die FEM-Simulation des Acoustic Streaming durch Zeitmittelung der zeitabhängigen Lösung der kompressiblen Navier-Stokes-Gleichung nur bei 2d-Geometrien effizient ist [Köster06A]. In experimentell relevanten 3d-Gebieten übersteigt die Simulation der Akustik die Speicherkapazität moderner Rechner um ein Vielfaches und würde Rechenzeiten von mehreren Monaten erfordern. Anstatt die zeitgemittelte Acoustic Streaming-Volumenkraft explizit auszurechnen, wird deshalb oft ein Kraftmodell eingesetzt und die inkompressible Navier-Stokes-Gleichung gelöst. In zwei Dimensionen hat es bereits erfolgreiche Simulationen der Strömungen im Kapillarspalt [Guttenberg04] und von freien Oberflächen [Schindler06] mit einem effektiven Kraftansatz gegeben. Für unsere 3d-Experimente entwickeln wir einen Ausdruck zur Modellierung der Acoustic Streaming-Volumenkraft, dessen Proportionalitäten und eingehende Konstanten aus Experiment und Literatur abgeleitet werden. Zur umfassenden Behandlung wird die lokale SAW-Intensität als Ursache des Acoustic Streaming ebenso simuliert, wie die Geometrie der freien Oberflächen des Flüssigkeitsvolumens. Wurden bislang die Reflexionsvorgänge der Schallwelle an solchen Grenzflächen nur in der Simulation von D. Köster [Köster06A] berücksichtigt, so beziehen wir diese durch einen Raytracing-Algorithmus ein.

Kapitel 5 beschäftigt sich mit Mischen in der SAW-Fluidik. Für Lab-on-a-chip-Reaktionen ist eine homogene Durchmischung notwendig, die innerhalb kurzer Zeit mit geringem Energieaufwand erzielt werden muss. In der Mikrofluidik stellt Mischen eine komplexe Aufgabe dar, da durch die laminaren Strömungen lediglich die Diffusion zur Durchmischung führt [Purcell77]. Damit die diffusive Homogenisierung in akzeptabler Zeit stattfindet, benötigt man Geometrien, deren Ausdehnungen senkrecht zur Flussrichtung nur wenige Mikrometer groß sind. In beliebig geformten Geometrien tut demnach ein alternatives Konzept effektiven Mischens Not. Das von Hassan Aref erforschte Prinzip der chaotischen Advektion [Aref84] wurde bereits in Kanalströmungen zur Mischung herangezogen [Stroock02]. Wir werden die chaotische Advektion in einem zylindrischen Wasservolumen herbeiführen auf dessen Größenskalen weder Turbulenzen noch Diffusion eine Rolle spielen. Zu verschiedenen Antriebskonfigurationen werden in Experiment und Simulation die optimalen Betriebsparameter ermittelt. Zum Vergleich berechnen wir auf einer systemrelevanten Skala den inversen Variationskoeffizient, der ein Maß für die Mischungsqualität darstellt.

Den Abschluss der Arbeit bildet in Kapitel 6 eine Übersicht von Sortiermechanismen, die auf grundsätzliche Machbarkeit getestet werden. Der erste Teil beschäftigt sich mit gezielter Migration von Teilchen durch Dielektrophorese. Mit dem Effekt der negativen Dielektrophorese wird so eine Umleitung von Teilchen in Mikrofluidik-Kanälen realisiert. Die positive Dielektrophorese dient zur Abscheidung von einwandigen Kohlenstoff-Nanoröhren aus der Strömung. Die Optimalfrequenz zur Abscheidung bestimmen wir durch Messung der Impedanzänderung mit einem Richtkoppler. Im zweiten Teil stellen wir eine Methode zur größenselektiven Akkumulation von Teilchen in Wirbeln vor.

Kapitel 2

Akustische Wellen im Festkörper

An dieser Stelle folgt ein Einblick in die Akustik von Festkörpern, soweit es zum Verständnis dieser Arbeit notwendig ist. Wenn möglich wird die Thematik anhand von Daten zu LiNbO_3 128° rot Y-Cut veranschaulicht, das als Substrat für die späteren Experimente herangezogen wird. Als weitergehende Literatur empfiehlt sich [Viktorov67, Auld73A, Auld73B, Oliner73, Matthews77, Ash85, Datta86, Wong02].

2.1 Die Grundgleichungen der Akustik

Zur Beschreibung der Vorgänge innerhalb eines Festkörpers wird dieser in infinitesimale Volumenelemente zerlegt. Verlässt das Volumenelement seine Ruhelage in Richtung der Koordinatenachse x_i , so bezeichnen wir die entsprechende Auslenkung mit u_i . Ein Festkörper reagiert aufgrund seiner starken Bindungskräfte nicht nur auf Zug-/Druck-, sondern auch auf Scherkräfte. Zur Auslenkung u_i tragen demnach Zug-/Druckkräfte in Richtung x_i und Scherkräfte in Richtung x_k ($k \neq i$) bei. Damit lassen sich die Newtonschen Bewegungsgleichungen (mit der Einsteinschen Summenkonvention) aufstellen:

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j} \quad (2.1)$$

Dabei bezeichnet ρ die Dichte des Materials und T_{ij} den Spannungstensor. Die Diagonalelemente $T_{ij,i=j}$ beinhalten Zug-/Druckkomponenten, die Nicht-Diagonalelemente $T_{ij,i \neq j}$ die Scherkomponenten. Die Deformation des Volumenelements wird dabei durch den symmetrisierten Deformationstensor S_{kl} beschrieben:

$$S_{kl} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_l} + \frac{\partial u_l}{\partial x_k} \right) \quad (2.2)$$

Die elastische Deformation eines Festkörpers bei Einwirkung einer Spannung lässt sich durch das verallgemeinerte Hook'sche Gesetz beschreiben:

$$T_{ij} = c_{ijkl} S_{kl} \quad (2.3)$$

Hier geht der Elastizitätstensor c_{ijkl} ein, der die Bindungsverhältnisse widerspiegelt. Dieser Tensor 4. Stufe besitzt im Prinzip 81 Komponenten. Die Symmetrie des Deformationstensors S_{kl} und des Spannungstensors T_{ij} (wenn keine Drehmomente vorhanden sind) bewirkt, dass sich wegen

$$c_{ijkl} = c_{jikl} = c_{ijlk} = c_{jilk} \quad (2.4)$$

diese Anzahl auf 36 Komponenten reduziert. Das Poynting-Theorem der Akustik beweist darüber hinaus

$$c_{ijkl} = c_{klij} \quad (2.5)$$

sodass letztlich 21 Komponenten übrig bleiben. Entsprechende Kristallsymmetrie reduziert die Anzahl an unabhängigen Komponenten weiter. Soweit wurde in der Herleitung nicht berücksichtigt, dass es sich um ein piezoelektrisches Material handelt. Die Kopplung einer mechanischen Spannung an das elektrische Feld wird über den piezoelektrischen Tensor p_{kij} erreicht und modifiziert das Hooke'sche Gesetz:

$$T_{ij} = c_{ijkl}S_{kl} - p_{kij}E_k \quad (2.6)$$

Die Rückkopplung der Deformation auf die dielektrische Verschiebung D_i über die verschobenen permanenten Dipolmomente des Piezoelektrikums wird wie folgt berücksichtigt:

$$D_i = p_{ijk}S_{jk} + \epsilon_{ij}E_j \quad (2.7)$$

Hierbei ist ϵ_{ij} der dielektrische Tensor. Setzt man in die Bewegungsgleichungen (2.1) das Hooke'sche Gesetz (2.6), den Deformationstensor (2.2) und die elektrische Feldstärke

$$E_i = -\frac{\partial\Phi}{\partial x_i} \quad (2.8)$$

ein, so ergeben sich drei Wellengleichungen für die mechanischen Auslenkungen u_j :

$$\rho \frac{\partial^2 u_j}{\partial t^2} - c_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_i \partial x_l} - p_{kij} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_k \partial x_i} = 0 \quad (2.9)$$

Unter Verwendung der Maxwell-Gleichung

$$\nabla \cdot D = 0 \quad (2.10)$$

erhält man mit (2.2) und (2.7) eine vierte Wellengleichung für das Potential:

$$p_{ikl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_i \partial x_l} - \epsilon_{ik} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_i \partial x_k} = 0 \quad (2.11)$$

2.2 Akustische Volumenwellen

Wird zunächst der Festkörper ohne Grenzflächen betrachtet, so sind die Lösungen von (2.9) und (2.11) akustische Volumenwellen (*bulk acoustic waves, BAW*). Setzt man folgenden Ansatz für ebene Wellen

$$\begin{aligned} u_i &= \alpha_i \exp[ik(b_i x_i - vt)] \\ \Phi &= \alpha_4 \exp[ik(b_i x_i - vt)] \end{aligned} \quad (2.12)$$

mit der Ausbreitungsrichtung \vec{b} , der Phasengeschwindigkeit v und der Wellenzahl $k = \omega/v$ an, so kann man durch Einsetzen in die Wellengleichungen (2.9) und (2.11) den Koeffizient α_4 bestimmen:

$$\alpha_4 = \alpha_j (p_{ijk} b_i b_k) / (\epsilon_{pq} b_p b_q) \quad (2.13)$$

Damit ergibt sich für (2.9):

$$\rho v^2 \alpha_j = c'_{ijkl} b_i b_l \alpha_k \quad (2.14)$$

mit

$$c'_{ijkl} = c_{ijkl} (1 + K_{ijkl}^2) \quad (2.15)$$

und

$$K_{ijkl}^2 = \frac{p_{mij} p_{nkl} b_m b_n}{c_{ijkl} (\epsilon_{pq} b_p b_q)}. \quad (2.16)$$

Hieraus lässt sich direkt erkennen, dass die Piezoelektrizität zu einer Versteifung des Materials um den Faktor $(1 + K_{ijkl}^2)$ führt und es damit eine entsprechend höhere Schallgeschwindigkeit als im nicht-piezoelektrischen Fall besitzt. Der elektromechanische Kopplungskoeffizient K_{ijkl}^2 beträgt selbst bei starken Piezoelektrika weniger als 5%. Für gegebene Ausbreitungsrichtung und Polarisierung bekommt man eine einzelne Kopplungskonstante K_{eff}^2 , welche die Effizienz der Wellenanregung mit einem elektrischen Feld erklärt.

2.3 Auswirkungen der Anisotropie

Gleichung (2.14) kann durch Einfügen des Kronecker-Deltas δ_{jk} zur Christoffel-Gleichung umgeschrieben werden:

$$\begin{aligned} (\Gamma_{jk} - \delta_{jk} \rho v^2) \alpha_j &= 0 \\ \Gamma_{jk} &= b_i b_l c'_{ijkl} \end{aligned} \quad (2.17)$$

Die drei Eigenwerte dieser Gleichung ergeben die drei Phasengeschwindigkeiten $v^{(n)}$ und die Eigenvektoren $\vec{\alpha}^{(n)}$ (mit Komponenten $\alpha_j^{(n)}$) definieren die drei möglichen Polarisierungen der ebenen Welle für die vorgegebene Richtung \vec{b} . Diese Polarisationsvektoren sind im anisotropen Festkörper nicht zwingend parallel/senkrecht zur Ausbreitungsrichtung. Entsprechend werden diese Polarisierungen quasi-longitudinal/-transversal betitelt. Nur für bestimmte Richtungen mit kristalliner Symmetrie ergeben sich reine Moden.

Variiert man nun die Ausbreitungsrichtung \vec{b} , so ändert sich die Schallgeschwindigkeit der drei Moden. Dieser Effekt lässt sich am besten durch die Auftragung der inversen Schallgeschwindigkeit (*Slowness*) visualisieren. Allgemein besitzen aber die transversalen Moden aufgrund der schwächeren elastischen Kopplung eine 2-3fach geringere Schallgeschwindigkeit als die longitudinalen Moden.

2.4 Akustische Oberflächenwellen

Sobald eine Grenzfläche zum Vakuum vorliegt, beispielsweise bei $x_3 = 0$, erhält man zusätzliche Randbedingungen. Der Spannungstensor muss auf allen Flächen eines Volumenelements in Richtung x_3 verschwinden:

$$T_{31} = T_{32} = T_{33} = 0 \text{ für } x_3 = 0 \quad (2.18)$$

Die hier interessanten Lösungen der Wellengleichungen (2.9) und (2.11) sind Oberflächenwellen (*surface acoustic wave, SAW*), die parallel zur Grenzfläche mit der Phasengeschwindigkeit v_{SAW} propagieren und deren Auslenkung und Potential innerhalb eines Abstands weniger Wellenlängen ins Material hinein abklingen (siehe Abb. 2.1A). Im Rahmen dieser Arbeit ist es nicht möglich alle Eigenschaften von SAWs herzuleiten, es sollen aber die wichtigsten erörtert werden.

Für SAWs ergibt sich eine modifizierte Christoffel-Gleichung, aus der man drei mechanische und eine Potentialwelle als Lösung für die gegebene Ausbreitungsrichtung x_1 erhält. Alle vier Wellen besitzen dieselbe Phasengeschwindigkeit und verschwinden für $x_3 \rightarrow -\infty$, aber nur für genau eine Phasengeschwindigkeit v lässt sich eine Linearkombination der vier Teilwellen finden, welche die Randbedingungen (2.18) erfüllt.

Im isotropen Kristall (oder wenn die Schwingungsebene im Kristall Spiegelsymmetrie aufweist) heißen die Lösungen Rayleigh-Wellen, benannt nach ihrem Entdecker Lord Rayleigh [Rayleigh85]. Diese Wellen oszillieren in der Sagittalebene x_1, x_3 , haben also einen longitudinalen und einen transversalen Anteil, der in Richtung x_3 zeigt (vgl. Abb. 2.1). Die Gitterverzerrung und die elliptische Bewegung eines Gitterpunkts sind in Abb. 2.1B dargestellt (vgl. saw.mov auf DVD). Eine Rayleigh-Welle auf isotropen Substraten ist immer ca. 10% langsamer als die langsamste BAW, wodurch es aufgrund fehlender Phasen Anpassung keine Kopplung (Energieaustausch) untereinander gibt. In speziellen anisotropen Fällen oder bei Unstetigkeiten der Randbedingungen (z.B. am Chiprand) kann eine Konvertierung stattfinden.

Für anisotropes Material hängen die Phasengeschwindigkeit (Slowness), die Gruppengeschwindigkeit und die Auslenkungen der Welle von der Wahl der freien Oberfläche und der Ausbreitungsrichtung ab. Insbesondere ist in einem anisotropen Kristall die Richtung des Energieflusses nicht zwingend parallel zur Ausbreitungsrichtung der Welle, die vom anregenden Bauteil vorgegeben wird. Den Winkel Ψ (*Power-Flow-Angle*) zwischen dem Vektor des Energieflusses \vec{W} und dem der Ausbreitung \vec{b} kann man auch in der sog. Slowness-Kurve ablesen. Die Slowness-Kurve erhält man durch polare Auftragung der inversen Phasengeschwindigkeit $1/v_{SAW}$, wie in Abb. 2.2 für LiNbO₃ 128° rot Y-Cut geschehen. Der Winkel Ψ wird zwischen der Ausbreitungsrichtung und der entsprechenden Normalen auf die Slowness-Kurve bestimmt. Die ausgewählten Richtungen mit $\Psi = 0$ werden als reine Moden bezeichnet. Wird nun zusätzlich die Piezoelektrizität berücksichtigt, so hängen die Welleneigenschaften von den elektrischen Randbedingungen ab. Die Versteifung der elastischen Konstanten schlägt sich in einer Erhöhung der Schallgeschwindigkeit nieder. Diese wurde im Fall der BAW durch den

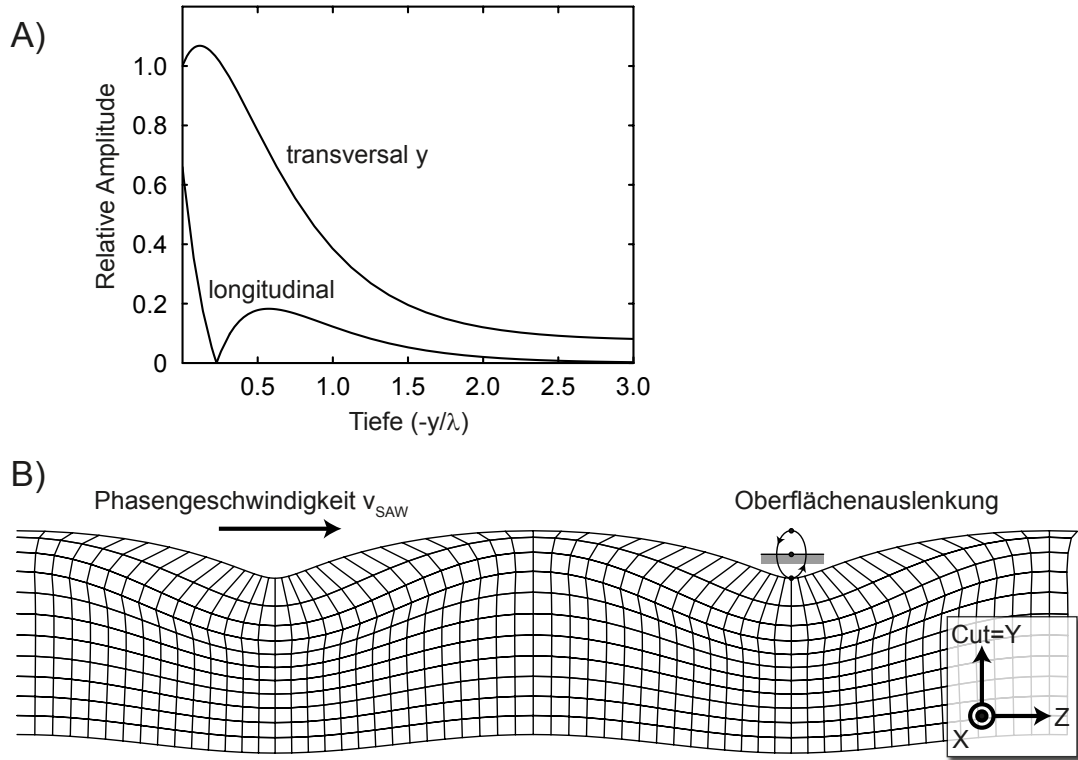


Abbildung 2.1 Amplitudenverlauf und Gitterverzerrung einer Rayleigh-Welle auf LiNbO₃ Y-Cut: **(A)** Die Amplitude der longitudinalen und transversalen Schwingung klingt innerhalb weniger Wellenlängen unterhalb der Oberfläche ab. **(B)** In der Sagittalebene wird das Gitter durch die Welle verzerrt. Die Abbildung verdeutlicht die elliptische Trajektorie eines Gitterpunkts um seine Ruhelage (vgl. saw.mov auf DVD). Zur Visualisierung wurde die Verzerrung (eigentlich im Bereich Å) in den Bereich der Wellenlänge skaliert (nach [Matthews77]). Für LiNbO₃ Y-Cut gilt $x_1 = Z$, $x_3 = Y$ und die Schnittachse Cut ist gleich der Y-Kristallachse (vgl. Abb. 2.2C).

elektromechanischen Kopplungskoeffizienten (2.16) wiedergegeben. Aufgrund ihrer Inhomogenität erlaubt die SAW nicht die Berechnung dieser Größe aus den elastischen Konstanten, denn die Zusammenhänge zwischen Potential Φ und Auslenkungen u_i variieren mit dem Abstand von der Grenzfläche. Stattdessen definiert man einen effektiven elektromechanischen Kooplungskoeffizienten K_{eff}^2 wie folgt:

$$\frac{K_{eff}^2}{2} = \frac{v_f - v_s}{v_f} \quad (2.19)$$

Dabei ist v_f die Schallgeschwindigkeit der freien Oberfläche und v_s die Schallgeschwindigkeit ohne Piezoelektrizität, die durch Kurzschluss der Oberfläche mittels einer dünnen Metallschicht gemessen werden kann. Dieses K_{eff}^2 beschreibt wie Gl. (2.16) die Effizienz der Anregung und Detektion der SAW. Im folgenden Abschnitt werden nun die Eigenschaften relevanter Schnitte von LiNbO₃ vorgestellt.

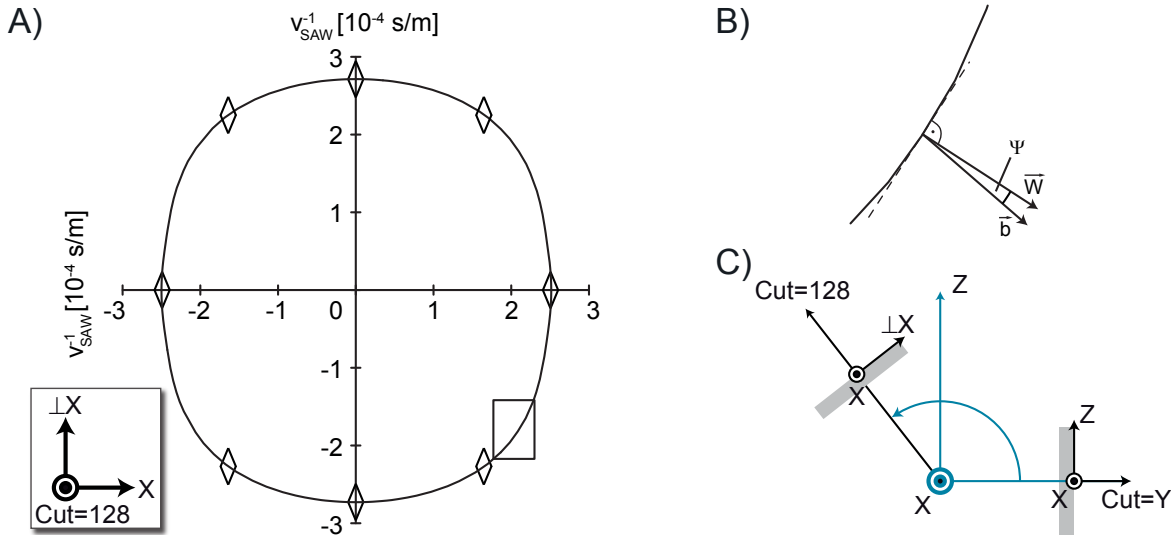


Abbildung 2.2 (A) Die Slowness-Kurve von LiNbO_3 128° rot Y-Cut nach [Slobodnik73]. Die reinen Moden sind mit \diamond markiert. (B) Ein Ausschnitt der Kurve dient zur Veranschaulichung des Power-Flow-Angle Ψ . Die Ausbreitungsrichtung \vec{b} weicht klar von der Richtung des Leistungsflusses \vec{W} ab, die auf der Slowness-Kurve senkrecht steht. (C) Die Schnittachse in LiNbO_3 128° rot Y-Cut fällt nicht mit einer Kristallachse zusammen, weshalb die Bezeichnungen $\perp X$ und $\text{Cut} = 128$ eingeführt werden. LiNbO_3 Y-Cut kann hingegen durch die Kristallachsen beschrieben werden.

2.5 Eigenschaften von LiNbO_3

LiNbO_3 Y-Cut wird wie in Abb. 2.2C angedeutet in der XZ-Kristallebene senkrecht zur Schnittachse $\text{Cut} = Y$ geschnitten und ermöglicht nur entlang der Z-Kristallachse die Anregung einer Rayleigh-Welle, die eine Bewegungskomponente aus der Substratebene heraus besitzt (vgl. Abb. 2.1) und damit für Fluidik geeignet ist (vgl. Kapitel 2.9). Entlang der X-Kristallachse erzeugt man eine oberflächennahe Volumenwelle (*surface skimming bulk wave*, *SSBW*) die allerdings nur Bewegungskomponenten in der Substratebene besitzt [Lewis85] und deshalb für Fluidik ungeeignet ist (vgl. Kapitel 2.9).

In den folgenden Kapiteln wird das Material LiNbO_3 128° rot Y-Cut verwendet, dessen um die X-Kristallachse rotierte Schnittachse $\text{Cut} = 128$ nicht mit den Kristallachsen zusammenfällt (vgl. Abb. 2.2C). LiNbO_3 128° rot Y-Cut besitzt den Vorteil, sowohl entlang der X-Kristallachse als auch senkrecht dazu (in diesem rotierten Schnitt $\perp X$, nicht die Z-Kristallachse) Wellen mit Bewegungskomponenten aus der Substratebene heraus anregen zu lassen. Die Kopplungskoeffizienten K_{eff}^2 sind zwar unterschiedlich, aber trotzdem ausreichend groß um starke Wellen für Fluidik zu erzeugen (vgl. Tab. 2.1). Zur Bestimmung der reinen Moden des Kristalls dient die Slowness-Kurve. Diese polare Auftragung der inversen Phasengeschwindigkeit erlaubt den Vergleich der Ausbreitungsrichtung $\vec{b} = (\sin(\varphi), 0, \cos(\varphi))$ mit der Richtung des Energieflusses, die auf der Slowness-Kurve senkrecht steht. Abb. 2.2 zeigt die Slowness-Kurve nach Daten von [Slobodnik73]. Die reinen Moden bei $\Psi = 0$ ergeben sich bei Maxima und Minima der Phasengeschwindigkeit v_{SAW} (gekennzeichnet mit \diamond), also auch in X- und $\perp X$ -Richtung. Damit kann auf LiNbO_3 128° rot Y-Cut, im Gegensatz zu LiNbO_3 Y-Cut,

phys. Größe	Y-Cut		128° rot Y-Cut	
Propagation	Z	X	X	⊥X
Wellentyp	Rayleigh-Welle	SSBW	Rayleigh-Welle	
K_{eff}^2 [10^{-2}] [Slobodnik73]	4.50	1.55	5.22	1.42
v_f [m/s] [Slobodnik73]	3488	3770	3989	3675
v_s [m/s] [Slobodnik73]	3410	3741	3885	3649
Dichte [kg/m^3] [Takanaga02]	4648			
Therm. Leitföh. [W/m K] [Lin01]	4.2			
spez. Widerstand [Ωm] [Blistanov83]	$2 \cdot 10^{10}$ bei 200°C			
rel. Auslenkung (c_x, c_y, c_z) [$\text{\AA}/\text{V}$] [Datta86]	(0, 1.8i, -1.2)	–	(0, 2.0, 1.8i)	–

Tabelle 2.1 Zusammenstellung physikalischer Daten für verschiedene Schnitte von LiNbO_3 mit Quellenangaben.

in zwei orthogonalen Richtungen Fluidik betrieben werden, was gerade im Kapitel 5 mehr Varianten erlaubt. Der Schnitt LiNbO_3 128° rot Y-Cut maximiert K_{eff}^2 für die versteifte Rayleigh-Welle entlang der X-Kristallachse und eignet sich deshalb besonders für Sensorik. Außerdem können in diesem Schnitt entlang der X-Kristallachse keine Volumenwellen angeregt werden, was für Filteranwendungen essentiell ist.

Wichtige physikalische Kenngrößen für die verschiedenen Schnitte von LiNbO_3 sind in Tab. 2.1 aufgeführt. Die tensoriellen Größen ϵ_{ij} , p_{ijk} und c_{ijkl} finden sich für LiNbO_3 im Anhang Tab. B.3. Dort wurde für die Tensoren die Voigt-Notation gewählt, welche die Darstellung in zwei Dimensionen erlaubt und gängigerweise für Berechnungen verwendet wird (siehe [Auld73A]).

2.6 Anregung von SAWs

Zur Erzeugung von akustischen Wellen in Festkörpern verwendet man den inversen piezoelektrischen Effekt. Eine Elektrode an der Oberfläche eines Piezoelektrikums kann mittels eines Spannungspulses eine Gitterverzerrung hervorrufen, die sich vom Ort der Anregung mit der Geschwindigkeit der SAW v_{SAW} entfernt. Eine Wechselspannung der Frequenz f erzeugt also eine Störung der Periode $T = 1/f$, die nach einer Umlaufzeit gerade die Strecke

$$\lambda_{SAW} = \frac{v_{SAW}}{f} \quad (2.20)$$

zurücklegt. Bringt man nun an dieser Stelle eine weitere Elektrode an und speist sie mit demselben Signal, so wird die Welle verstärkt. Diese phasenrichtige Verstärkung wird im Interdigital-Schallwandler (*interdigital transducer*, *IDT*) [White65] zur Generierung von SAWs verwendet. In Abb. 2.3A ist ein normaler IDT zur Erzeugung eines Schallpfades der Breite d dargestellt. Der Abstand von Fingern der gleichen Polarität definiert nach Gl. (2.20) die Resonanzfrequenz¹, in deren Bereich vom IDT eine SAW erzeugt wird. Dadurch wird die Filterwirkung eines IDTs erklärt. Die kammartig

¹Die Anregungsfrequenz mit maximaler Leistungsaufnahme des IDTs weicht davon i.a. ab.

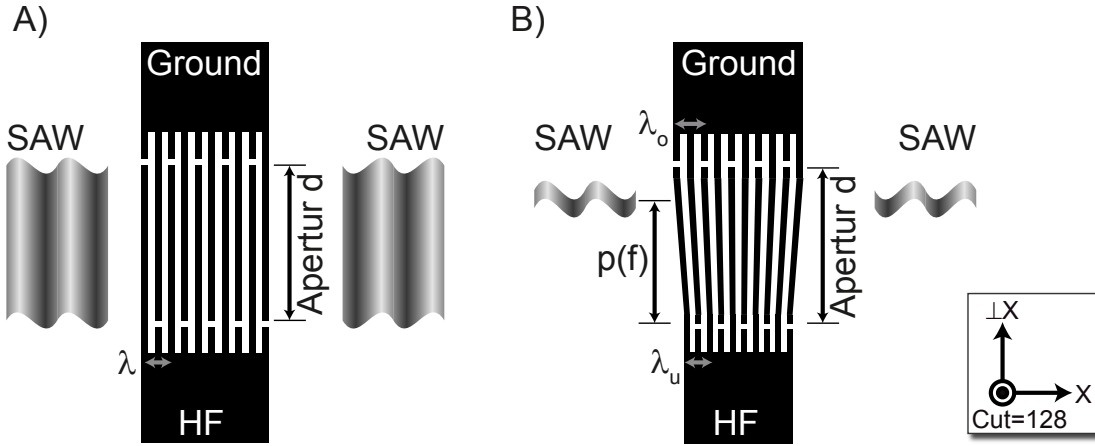


Abbildung 2.3 (A) Ein normaler IDT zur Erzeugung einer Wellenfront der Breite d für SAW-Wellenlängen $\lambda_{SAW} \approx \lambda$. (B) Ein TIDT mit verjüngendem Schallpfad zur Erzeugung von Wellenlängen im Bereich λ_u bis λ_o .

ineinandergreifenden Finger werden alternierend mit dem hochfrequenten Wechselfspannungssignal (*HF*) und der Masse (*Ground*) kontaktiert. Die so angeregte SAW wird symmetrisch zu beiden Seiten abgestrahlt. Damit bleibt i.a. eine der beiden Wellen und damit die halbe Leistung ungenutzt. Dies kann durch Reflektorstrukturen verhindert werden, die aber zusätzlichen Raum einnehmen, weshalb bei unseren Fluidikexperimenten darauf verzichtet wurde. Die Anzahl an Fingern pro Elektrode richtet sich nach der Größe von K_{eff}^2 . Bei starken Piezoelektrika wie LiNbO_3 reichen 40-50 Finger pro Elektrode aus, für ein schwaches Piezoelektrikum wie GaAs benötigt man etwa die doppelte Anzahl. Zuviele Finger jedoch beanspruchen nicht nur Raum, sondern können auch die Impedanzanpassung des IDTs verschlechtern, wodurch dieser weniger Leistung aufnimmt. Ein Finger kann noch mehrmals unterteilt werden, um Oberwellen effektiv anregen zu können. Einen IDT mit n -fach geteilten Fingern nennt man Split- n IDT. In dieser Arbeit werden nur Split-1 IDTs mit ungeteilten Fingern verwendet.

In Abb. 2.3B ist ein verjüngter Schallwandler (*tapered IDT*, *TIDT*) [vandenHeuvel72] dargestellt. Entlang der Apertur verändert sich der Abstand der Finger von λ_o zu $\lambda_u (< \lambda_o)$ linear, und ebenso die Wellenlänge und Anregungsfrequenz der SAW. Ein HF-Signal der Frequenz f erzeugt also nur in der Umgebung der Orte eine SAW, welche die Resonanzbedingung (2.20) lokal erfüllen. Dadurch erlaubt der TIDT über die Wahl der Frequenz die Anregung eines schmalen Schallpfades an einer gewünschten Position $p(f)$ der Apertur d (vgl. Abb. 2.3B):

$$p(f) = d \frac{\lambda(f) - \lambda_u}{\lambda_o - \lambda_u} = d \frac{f_o}{f} \frac{f_u - f}{f_u - f_o} \quad (2.21)$$

Hierbei ist f_u die maximale Frequenz, f_o die minimale Frequenz, bei der vom TIDT noch SAWs ausgehen. Um die Schallpfadbreite grob abzuschätzen definiert man den Verjüngungsfaktor t (nach [Streibl00]):

$$t = \frac{\lambda_o - \lambda_u}{\lambda_o} \quad (2.22)$$

Für nicht zu große t gilt:

$$f_u \approx (1 + t) f_o \quad (2.23)$$

Damit ergibt sich die 3dB Bandbreite zu:

$$B_{3dB}^{tIDT} \approx t f_o \quad (2.24)$$

Für zu kleine t muss allerdings ein anderer Term betrachtet werden, denn selbst ein nichtverjüngter IDT besitzt eine Bandbreite aufgrund seiner begrenzten Anzahl N an Fingern:

$$B_{3dB} \approx 0.9 \frac{f_o}{N} \quad (2.25)$$

Die effektive Schallpfadbrite w_{eff} kann nun aus (2.24), (2.25) und der Apertur d abgeschätzt werden:

$$w_{eff} = d \frac{B_{3dB}}{B_{3dB}^{tIDT}} \quad (2.26)$$

Um die Intensitätsverteilung im SAW-Schallpfad-Profil zu berechnen wird in Kapitel 4.4.2 ein Programm zur Berechnung vorgestellt.

2.7 Einheiten von Leistung und Dämpfung

Die Dämpfungsfaktoren und Leistungen in der HF-Technik werden zumeist in logarithmischen Einheiten angegeben. Die Leistung in dBm erhält man aus:

$$P(\text{dBm}) = 10 \log_{10} \left(\frac{P(W)}{1 \text{ mW}} \right) \quad (2.27)$$

Auch Dämpfung und Transmission werden oft in dB angegeben:

$$T(\text{dB}) = 10 \log_{10} \left(\frac{P_2(W)}{P_1(W)} \right) \quad (2.28)$$

2.8 Sensorik mit Verzögerungsleitungen

Wenn man IDTs als Transmissionsfilter verwendet, ordnet man sie in einer sog. Verzögerungsleitung an. Wie in Abb. 2.4 dargestellt werden zwei IDTs entlang einer reinen Mode platziert, so dass die ausgesandte Welle den Empfangs-IDT mit maximaler Energie erreicht. Dieser Aufbau wird als Verzögerungsleitung bezeichnet, weil ein elektrisches Signal mit Geschwindigkeit $c_{koax} \approx 0.65 c_0$ (c_0 : Vakuum-Lichtgeschwindigkeit) in ein akustisches Signal mit $v \approx 1.8 \cdot 10^{-5} c_{koax}$ konvertiert wird, was einer starken Verzögerung der Signalausbreitung entspricht. Aufgebrachte Oberflächenbeschichtungen [Hörner05] oder Adsorbate [Müller04] beeinflussen die darunter propagierende SAW (z.B. Ausbreitungsgeschwindigkeit) und damit die Transmissionseigenschaften der Verzögerungsleitung. Auf dieser Grundlage basiert die SAW-Sensorik.

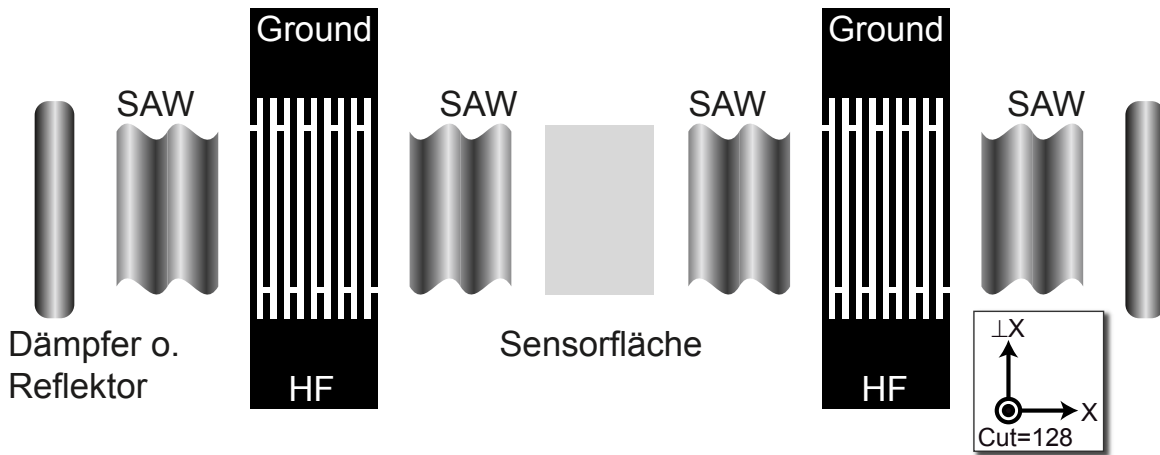


Abbildung 2.4 Eine Verzögerungsleitung besteht aus einem Sende- und einem Empfangs-IDT, die entlang einer reinen Mode angeordnet sind, sodass die maximale Leistung transmittiert wird. In der Verzögerungsleitung kann auf der Oberfläche Sensorik betrieben werden, da die Transmissionscharakteristik der SAW von Oberflächenschichten stark beeinflusst wird. Je nach Anwendung werden die bidirektional abgestrahlten Wellen gedämpft oder durch Reflektoren in den Sensorbereich abgelenkt.

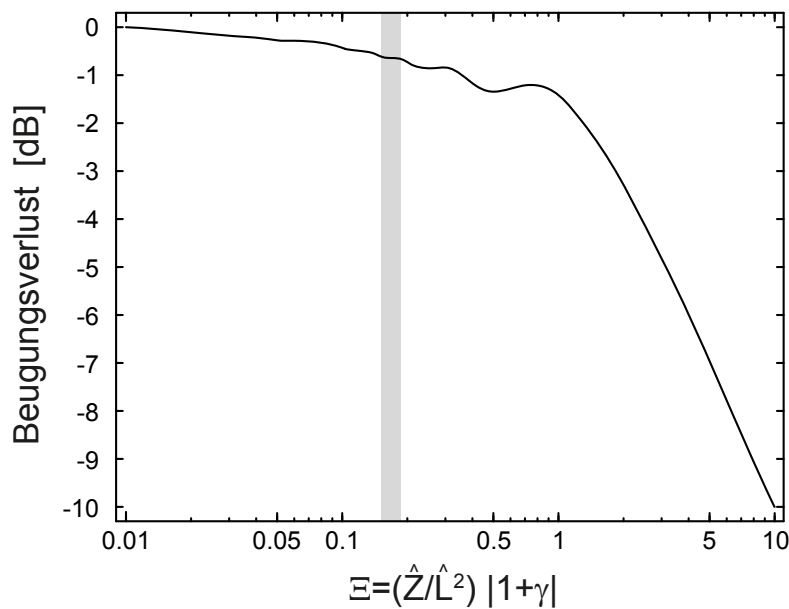


Abbildung 2.5 Die Auftragung zeigt den Beugungsverlust einer Verzögerungsleitung in Abhängigkeit vom Parameter Ξ (nach [Oliner73] S260). Für die Verzögerungsleitung aus Kapitel 4.2.4 bewegt sich Ξ im markierten Bereich. Der Beugungsverlust von ca. -0.6 dB ist gering.

Beim Design von Verzögerungsleitungen berücksichtigt man insbesondere, dass ab einem gewissen Abstand der IDTs die Beugungsverluste rasch zunehmen. Für Materialien, die in der parabolischen Geschwindigkeitsnäherung behandelt werden können, kann der Beugungsverlust über folgenden Parameter genau bestimmt werden ([Oliner73] S259):

$$\Xi = \frac{\hat{Z}}{\hat{L}^2} |1 + \gamma| \quad (2.29)$$

\hat{Z} bezeichnet dabei den Abstand der IDTs und \hat{L} die Breite des Schallpfades (beide in Einheiten der Wellenlänge λ_{SAW}). γ ist der Näherungsfaktor für die parabolische Approximation der SAW-Geschwindigkeit um die reine Mode. Wertet man Ξ nach Gl. (2.29) aus, so erhält man aus der Auftragung in Abb. 2.5 den entsprechenden Beugungsverlust. Dieser Beugungsverlust wird nur als Schätzung betrachtet, da LiNbO₃ Y-Cut und LiNbO₃ 128° rot Y-Cut nur in einem begrenztem Winkelbereich mit der parabolischen Geschwindigkeitsnäherung behandelt werden können (siehe Anhang A.2). In dieser Arbeit wird eine Verzögerungsleitung zur Messung der 1/e-Abklinglänge der SAW-Intensität bei Fluidbelag in Kapitel 4.2.4 verwendet. Die zugehörigen Beugungsverluste bewegen sich im markierten Bereich in Abb. 2.5 bei $T \approx -0.6$ dB und sind damit unkritisch.

2.9 Dämpfung von Oberflächenwellen

Sobald die Dicke des aufgetragenen Materials nicht mehr vernachlässigbar gegen die Wellenlänge der Oberflächenwelle ist, wird nicht nur die SAW-Geschwindigkeit beeinflusst, sondern auch die SAW-Amplitude durch Wellenabstrahlung verringert. Die Kopplung an das Oberflächen-Medium ist dabei abhängig von den Bewegungskomponenten der Welle: Eine transversale Bewegung senkrecht zur Substratoberfläche erzeugt longitudinale akustische Wellen im Oberflächen-Medium (out-of-plane Dämpfung α_{op}), eine longitudinale oder transversale Bewegung in der Substratoberfläche erzeugt über die Viskosität Scherwellen (in-plane Dämpfung α_{ip}).

Der Energieverlust durch die Wellenabstrahlung lässt sich für die einzelnen Komponenten nach [Dransfeld70] abschätzen:

$$\alpha_{op} = \frac{\rho_F v_F}{\rho_{SAW} v_{SAW} \lambda_{SAW}} \quad (2.30)$$

$$\alpha_{ip} = \left(\frac{\eta \rho_F}{4\pi \rho_{SAW}^2 v_{SAW}} \right)^{1/2} \lambda_{SAW}^{-3/2} \quad (2.31)$$

Dabei bezeichnet ρ_F und v_F Dichte und Schallgeschwindigkeit der Flüssigkeit, ρ_{SAW} und v_{SAW} analog die Größen der Oberflächenwelle und λ_{SAW} deren Wellenlänge. Zusätzlich gehen in α_{ip} die Viskosität η und die Anregungsfrequenz f ein. Nimmt man diese Formeln als Schätzwerte für Wasser, so erhält man für die 1/e-Abklinglängen der SAW-Intensität l_{op} und l_{ip} (in X- und \perp X-Richtung auf LiNbO₃ 128° rot Y-Cut) in

Einheiten der Wellenlänge λ_{SAW} :

$$l_{op\perp X}^{Calc} = 11.5 \lambda_{SAW\perp X} \quad (2.32)$$

$$l_{opX}^{Calc} = 12.5 \lambda_{SAWX} \quad (2.33)$$

$$l_{ip\perp X}^{Calc} = 9.99 \cdot 10^5 \lambda_{SAW\perp X}^{3/2} \quad (2.34)$$

$$l_{ipX}^{Calc} = 1.04 \cdot 10^6 \lambda_{SAWX}^{3/2} \quad (2.35)$$

Bei 150 MHz sind die 1/e-Abklinglängen $l_{ip\perp X}$ und l_{ipX} mit etwa 13 cm erheblich größer als die Ausdehnungen der Kontaktfläche Wasser-Substrat, wodurch Wellen mit in-plane Bewegung in der Mikrofluidik vernachlässigbar sind. Die Störungsrechnung, die den Abschätzungen (2.32), (2.33), (2.34) und (2.35) zugrunde liegt, gilt im Grenzfall starker akustischer Fehlanpassung zwischen der Flüssigkeit und dem Substratmaterial. Für flüssiges Helium ist im Experiment $l_{op}^{Exp} \approx 0.59 l_{op}^{Calc}$ [Cheeke81]. Da die akustische Impedanz $\rho_{H_2O} v_{H_2O}$ von Wasser ungefähr fünfzig mal besser an das Substrat angepasst ist, ist bei Wasser der Korrekturfaktor noch kleiner zu erwarten. Dies wird durch die Messung von l_{op}^{Exp} in Kapitel 4.2.4 bestätigt.

2.10 Abschätzung der SAW-Amplituden

In [Datta86] wird ein Modell vorgestellt, dass die Berechnung der SAW-Auslenkungen an der Oberfläche erlaubt, indem die SAW als Transmissionsleitung betrachtet wird. Aus der spez. Feldadmittanz y_0 lässt sich so das Oberflächenpotential der SAW bestimmen:

$$\Phi = \sqrt{2 \frac{1}{y_0} \frac{P_{SAW} \lambda_{SAW}}{d}} \quad (2.36)$$

Hierbei geht die Verteilung der SAW-Leistung P_{SAW} (gemessen in Watt) auf der Apertur des IDTs d ein. Die relativen Auslenkungskonstanten (c_x, c_y, c_z) aus Tab. 2.1 erlauben nun nach

$$(u_x^0, u_y^0, u_z^0) = \Phi (c_x, c_y, c_z) \quad (2.37)$$

die Berechnung der SAW-Amplituden (u_x^0, u_y^0, u_z^0) . Die spezifische Feldadmittanz y_0 lässt sich nach folgender Gleichung bestimmen:

$$y_0 = \frac{2\pi\epsilon_0 (1 + \epsilon_p) v_f}{K_{eff}^2} \quad (2.38)$$

Neben den bereits bekannten Materialparametern aus Tab. 2.1 benötigt man die dielektrische Oberflächenkonstante ϵ_p , die aus den dielektrischen Konstanten ϵ_{ij} berechnet werden kann. In Anhang A.1 wird erläutert, dass die Herleitung von ϵ_p und die Frequenzabhängigkeit von ϵ_{ij} für hier relevante Frequenzen zwischen 120 MHz und 180 MHz keine genaue Bestimmung der Größe ϵ_p und y_0 zulassen. In Anhang A.1 und B.3 sind die Grenzwerte für y_0 und ϵ_p richtungsabhängig berechnet. In dieser Arbeit wird lediglich die Proportionalität zwischen der SAW-Leistung und dem Quadrat der SAW-Amplituden nach Gl. (2.36) und (2.37) verwendet.

Kapitel 3

Versuchskomponenten und Präparation

3.1 Der Mikrofluidik-Versuchsaufbau

3.1.1 Cantilever-Pin-Probenhalter

Ein Grundproblem bei miniaturisierten Bauteilen $O(100\,\mu\text{m})$ ist stets die Kontaktierung an die erheblich größeren Zuleitungsstecker $O(1\,\text{cm})$. Für gewöhnlich klebt man dazu die Probe auf einen Sockel, der mit Metallpins $O(1\,\text{mm})$ versehen ist (siehe Anhang Abb. B.3A). Diese werden über den Probenhalter mit den Zuleitungen verbunden. Man nähert sich dem Mikrobauteil demnach um eine Größenordnung. Für die Kontaktierung der Chipelemente benötigt man einen Bonder, der die Bauteile mit den Pins über $20\,\mu\text{m}$ dünne Drähte verbindet (siehe Anhang Abb. B.3B). Der Zeitaufwand des Bondens für jede Probe ist nicht unerheblich. Zusätzlich wird die Reinigung des Chips erschwert durch die fragilen, fest verschweißten Bond-Verbindungen.

Wie Abb. 3.1A zeigt, werden unsere Mikrofluidik-Chips deshalb zumeist über sog. Pogo-Pins kontaktiert. Diese bestehen aus einer Hülse, in der ein federnd gelagerter Kontaktstift integriert ist. Diese Pogo-Pins können über einen Klappmechanismus auf den Chip abgesenkt werden und kontaktieren zerstörungsfrei die Probe. Ein Nachteil ist jedoch bereits in der Skizze 3.1A ersichtlich: Ein solcher Halter besitzt aufgrund der Pogo-Pins immer eine Höhe von etwa $15\,\text{mm}$. Die Breite eines Pins beläuft sich ebenfalls auf etwa $1 - 1.5\,\text{mm}$. Sollen nun auf einem Substrat von $12 \times 12\,\text{mm}^2$ mehrere Bauteile kontaktiert werden, so umschließen die reihum angeordneten Pogo-Pins den gesamten Chip. Das ungünstige Verhältnis von Halterhöhe und Chipgröße lässt das Substrat somit schnell unzugänglich werden. Um den Chip befüllen und später mit einem Auflichtmikroskop nah genug anfahren zu können, ist dieses Konzept hinderlich. Aufgrund der mechanischen Belastungen verliert der Aufbau darüber hinaus schnell an Genauigkeit.

In Abb. 3.1B stellen wir nun einen neuen Probenhalter vor, der die Vorteile der federnden Kontaktierung mit freiem Zugang von oben kombiniert. Ein Cantilever-Pin besteht

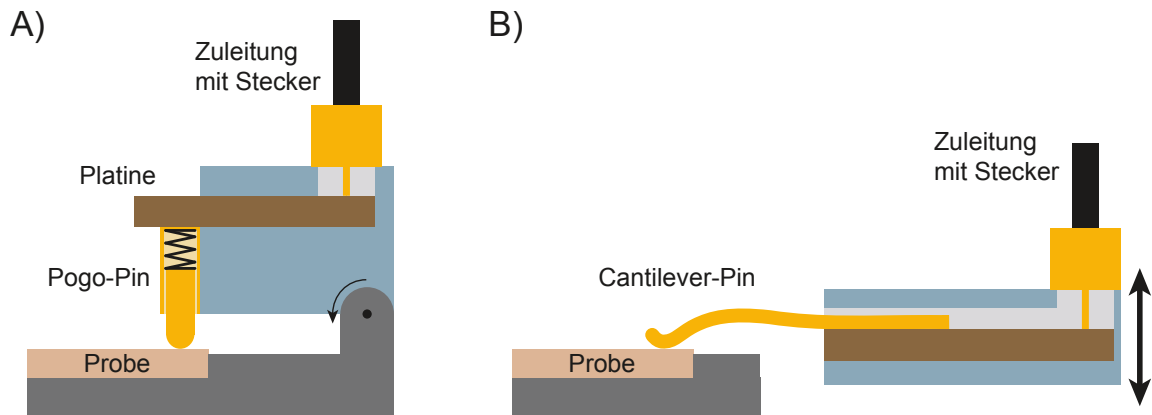


Abbildung 3.1 (A) Ein federnd gelagerter Pogo-Pin wird über einen drehbaren Halter auf die Probe gepresst. Die HF-Stecker sind über eine Platine mit den Pogo-Pins verbunden. (B) Ein Cantilever-Pin drückt ähnlich einer Balkenfeder auf den Chip.

aus einem Federstahldraht der Dicke $0.3 - 0.5 \text{ mm}$, der vernickelt und hartvergoldet ist. Damit verfügt er über die elastischen Eigenschaften einer Balkenfeder, überträgt aber hervorragend HF-Signale, die aufgrund des Skin-Effekts in der Goldschicht an der Oberfläche fließen. Der Aufbau lässt sich dadurch erheblich flacher gestalten und fast auf Höhe des Substrats absenken. Die sperrigen Zuleitungen und Kontakte werden fernab des Chips angebracht. Dabei benötigt ein Cantilever-Pin auf dem Chip nicht mehr Platz als ein Pogo-Pin.

Auf unserem Probenhalter (vgl. Abb. 3.2A) wurden zwölf Cantilever-Pins auf der Platine (1) angelötet. Wie in Abb. 3.2B dargestellt, werden acht Signale auf die Kontaktflächen an den Kanten des Chips übertragen, vier versorgen die Eckkontakte des Chips mit Masse. Die Platine wird zwischen zwei Metallplatten (2) und (3) aus Aluminium geschraubt und bildet den Anschlusskopf. Beide Platten sind geerdet und schirmen die Platine ab. Die obere Platte besitzt acht Bohrungen zum Einsetzen von HF-Steckern. Beide Platten verfügen über vier Durchgangsbohrungen. Beim Einsetzen gleiten die Passstifte (4) durch die Durchgangsbohrungen und zentrieren den Anschlusskopf immer an der gleichen Stelle über dem Probensockel. Dieser besteht aus dem dünnen Probenträger (5) aus Kupfer, in dem die Probe mit etwas Wärmeleitpaste eingesetzt wird. Direkt darunter dient ein Peltier-Element (6) der Temperatursteuerung des Chips. Die thermische Ankopplung der Chipoberfläche an das Peltierelement wird durch die Wärmeleiteigenschaften von LiNbO_3 (vgl. Tab. 2.1) und Kupfer unterstützt. Da das Peltier-Element zumeist zur Kühlung verwendet wird, muss die an dessen Unterseite gestaute Wärme abgeführt werden. Dies erfüllt der Kupferblock (7), an welchen von unten ein Kühlkörper in der Box (8) angebracht ist. Diese Box wird von Ventilatoren (9) gekühlt und ist auf einem Verfahrtschiff montiert, der die laterale Verschiebung des Aufbaus ermöglicht.

Diese Konzeption hat sich im Experiment bewährt. Der Chip kann rundum mit $0.5 \mu\text{l}$ Hamilton-Spritzen zur Befüllung erreicht werden. Daneben kann er jederzeit zur Reinigung im Ultraschallbad entnommen werden, was z.B. für vergleichbare Versuchsreihen

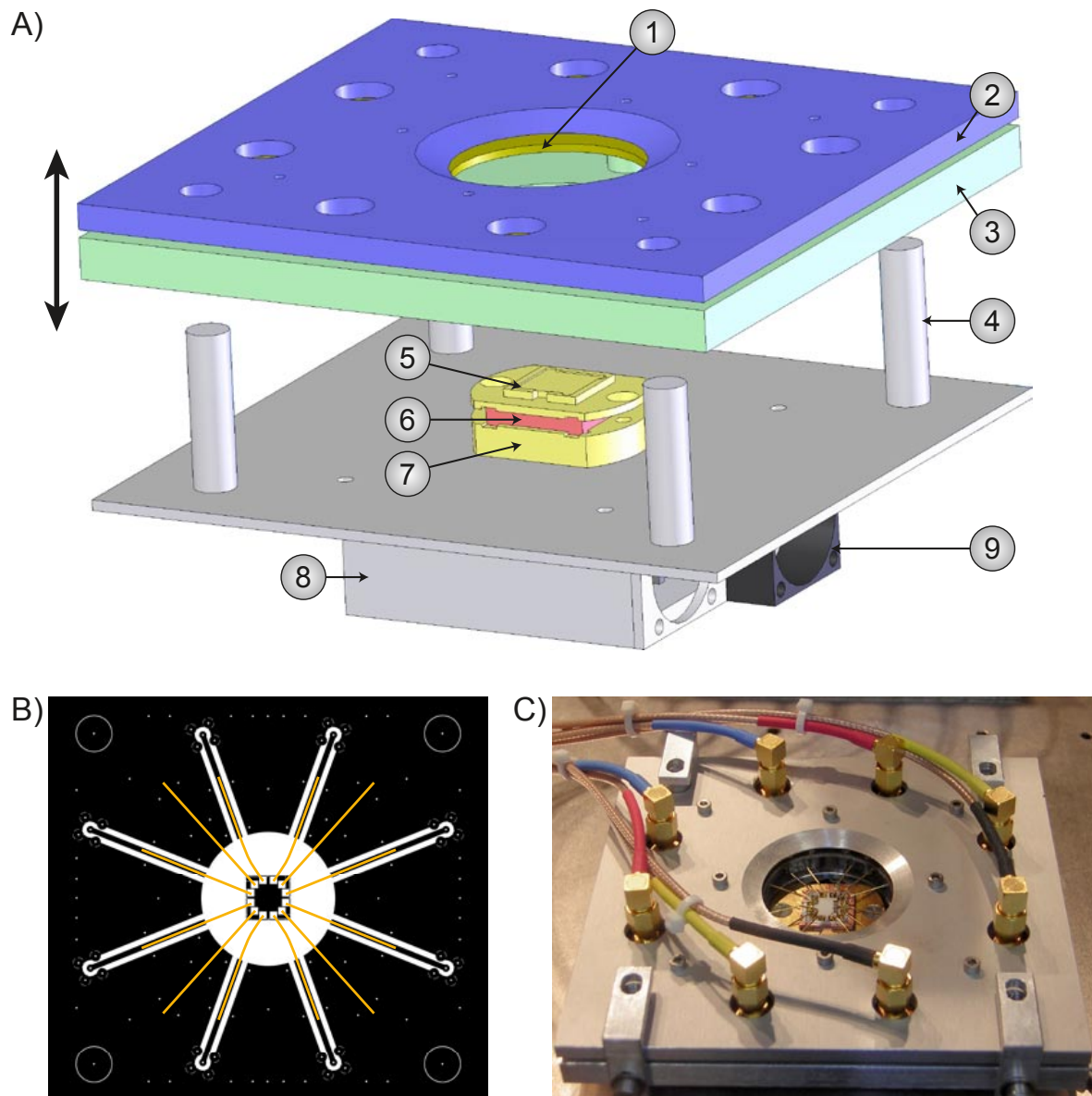


Abbildung 3.2 (A) 3d-CAD-Zeichnung des Cantilever-Pin-Probenhalters: Anschlusskopf aus Platine (1) sowie Platten (2) und (3); Passstifte (4) zur Zentrierung des Anschlusskopfes über dem Probensockel, bestehend aus Probenträger (5), Peltier-Element (6) und Wärmeableiter (7); außerdem der Wärmetauscher (8) mit Ventilatoren (9). (B) Die Cantilever-Pins werden auf die μ -strip Platine gelötet und bilden den Kontakt zwischen den HF-Steckern auf der Platine und dem Chip. Die diagonalen Cantilever-Pins sind dabei mit der Massefläche der Platine verbunden. (C) Das Foto zeigt den Probenhalter mit eingesetztem Chip und HF-Zuleitungen. Die vier zusätzlichen Klammern an den Ecken können zur Fixierung des Anschlusskopfes mit Schrauben verwendet werden.

an einem einzelnen Chip in Kapitel 5 notwendig ist. Der Arbeitsabstand wird durch die Cantilever-Pins nicht eingeschränkt.

Dennoch gibt es Verbesserungsvorschläge gegenüber dem hier vorgestellten Basismodell. Die Platten **(2)** und **(3)** sollten aus Stahl gefertigt werden, wodurch die Zentriergenauigkeit noch erhöht würde. Die HF-Stecker sollten an der Seite angebracht werden, damit sie nicht den Arbeitsabstand mancher Auflichtmikroskope begrenzen und die Platten noch dünner gehalten werden können.

3.1.2 HF-Generatoren

Für den Betrieb der IDTs stehen verschiedene HF-Generatoren zur Verfügung, je nach Einsatzgebiet. Experimente, in denen die Signale lediglich zum Antrieb der Flüssigkeit verwendet werden und die genaue Größe des Signals nicht ausschlaggebend ist, werden mit einer modifizierten Version der Microfluidic-Workstation der Firma Advantix durchgeführt. Die Microfluidic-Workstation (*MWS*) verfügt über vier unabhängige Kanäle (mit jeweils drei Ausgängen), die ein pulsweitenmoduliertes HF-Signal mit max. 29 dBm Leistung ausgeben. Die Pulsperiode liegt bei ca. $4\text{ }\mu\text{s}$, die genaue Leistung wird über das Tastverhältnis (*duty cycle*) variiert (die Fluidik glättet über diese Pulsbreite hinweg). Die Frequenz kann für jeden Kanal von 120 – 170 MHz in Schritten von 1 MHz eingestellt werden.

Für genauere Messungen stehen zwei Rhode & Schwarz SML01 zur Verfügung. Diese erzeugen jeweils ein kontinuierliches Signal (*cw-Signal*) im Frequenzbereich 9 kHz – 1.1 GHz und können kalibriert bis zu 13 dBm Leistung, unkalibriert bis zu 19 dBm abgeben. Außerdem können beide phasenstarr gekoppelt werden und verfügen über Amplituden-, Frequenz-, Phasen- und Pulsmodulatoren. Alternativ steht noch ein Rhode & Schwarz SMP 02 im Frequenzbereich 10 MHz – 20 GHz zur Verfügung.

3.1.3 Zusätzliche HF-Geräte

Um die HF-Signale mit fast 1 W Leistung schalten zu können, wurden sechs Leistungsschalter aufgebaut (vgl. Abb. 3.3A). Abb. 3.3B und C zeigen Prinzipskizze und Symbol eines Leistungsschalters, bestehend aus einem Eingang und zwei Ausgängen zwischen denen durch ein externes Spannungssignal umgeschaltet wird. Unser Modell benötigt für den zu öffnenden Ausgang eine Versorgungsspannung von $+6\text{ V}$, für den geschlossenen Ausgang -6 V . Die notwendigen Betriebskomponenten werden im nächsten Abschnitt beschrieben. Der geschlossene Ausgang sollte gut auf $50\text{ }\Omega$ angepasst werden, indem ein Abschlusswiderstand oder mindestens 6 dB Abschwächer angeschlossen wird.

Zur genauen Bestimmung der Leistung, die von einem Schaltkreis aufgenommen wird, benötigen wir einen Bidirektional-Richtkoppler. Dieses passive Bauteil koppelt einen geringen Teil der Leistung aus, die auf der Hauptleitung IN-OUT transmittiert und reflektiert wird. Ein Maß für die transmittierte Leistung kann so am FWD-Port und analog für die reflektierte Leistung am REF-Port bestimmt werden (vgl. Abb. 3.3D,E).

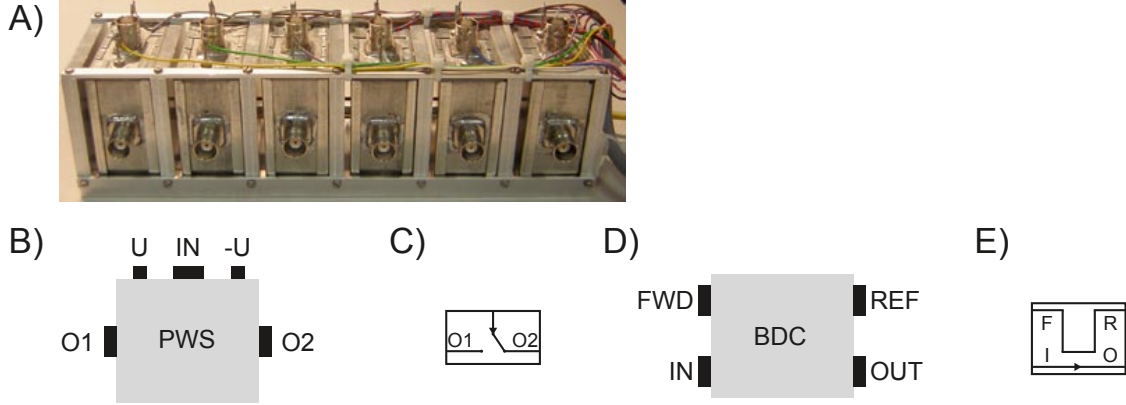


Abbildung 3.3 (A) Sechs Leistungsschalter im Rack mit Verkabelung zur externen Steuerung der Ein-/Ausgänge. (B) Prinzipskizze eines Leistungsschalters mit Eingang IN, Ausgängen O1 und O2 und Spannungsanschlüssen $\pm U$. (C) Leistungsschalter-Symbol zur Verwendung in Schaltungsdiagrammen. (D) Prinzipskizze eines Bidirektional-Richtkopplers mit Eingang IN, Ausgang OUT und Ports FWD und REF für die ausgekoppelte transmittierte und reflektierte Leistung. (E) Bidirektional-Richtkoppler-Symbol zur Verwendung in Schaltungsdiagrammen.

Der Richtfaktor (*coupling factor*)

$$F_{CPL}(\text{dB}) = -10 \log_{10} \left(\frac{P_{FWD}(W)}{P_{IN}(W)} \right) \quad (3.1)$$

gibt an, welcher Anteil der Leistung aus der Hauptleitung ausgekoppelt wird. Der Kopplungsverlust ist ein Term, der bei der Einfügedämpfung (*insertion loss*) des Bidirektional-Richtkopplers eine Rolle spielt. Hinzu kommen noch dielektrische und Leitungsverluste, die alle im Faktor F_{IL}

$$F_{IL}(\text{dB}) = 10 \log_{10} \left(\frac{P_{OUT}(W)}{P_{IN}(W)} \right) \quad (3.2)$$

zusammengefasst sind. Typischerweise sind diese Faktoren frequenzabhängig, weshalb der Hersteller hierfür zumeist einen Wertebereich angibt. Deshalb sollen hier stets vor der Messung die Faktoren für den entsprechenden Frequenzbereich ausgemessen werden.

Diese Größen lassen sich mit dem Netzwerkanalysator (NWA) ZVC von Rhode & Schwarz bestimmen. Die optimale Betriebsfrequenz eines IDTs bestimmt man mit dem NWA, indem im angezeigten Spektrum die Frequenz minimaler Reflexion identifiziert wird. Zur genauen Leistungsmessung findet ein Agilent E4402B Spectrum Analyzer (SpA) Anwendung.

3.1.4 Fluidik-Steuerung: Hardware

In mikrofluidischen Systemen spielt Trägheit keine Rolle, weshalb die Steuerungseigenschaften der Flüssigkeiten hervorragend sind. Gerade im Fall der SAW-Fluidik lässt sich die Flüssigkeit präzise von jedem handelsüblichen Rechner aus steuern. Die Microfluidic-Workstation wird eigentlich manuell mit einem Joystick bedient. Hier wurde

schaltet die Switchbox ebenfalls ab.

Zum Betrieb unseres Leistungsschalter-Racks sind nur die grünen Kabel der Switchbox notwendig. Eine zusätzliche Konverterbox erzeugt aus einem High-Eingangspegel ein $\pm 6\text{ V}$ Signal, sodass der Ausgang O1 des entsprechenden Leistungsschalters aktiviert wird. Zusätzlich wurden in die Switchbox Stromtreiber CCF integriert, um die notwendigen Ströme für die Diodenschaltungen der Leistungsschalter bereitzustellen. Die Schaltung CCC liefert eine Referenzspannung für die analogen Eingänge des C-Control, wird aber aktuell nicht verwendet.

Somit kann die Microfluidic-Workstation nach wie vor mit einem Joystick betrieben werden und wird im Setup dieser Arbeit durch Sicherheitsvorkehrungen geschützt. Außerdem können nicht nur unsere Leistungsschalter an der Konverterbox, sondern auch gewöhnliche Mini-Circuits Leistungsschalter direkt an der Switchbox gesteuert werden.

3.1.5 Fluidik-Steuerung: Software

Die Kommunikation mit dem C-Control Steuermodul erfolgt über die serielle Schnittstelle. Als komfortable Benutzeroberfläche wurde die „Transducer-Steuerung“ entwickelt. Hierbei handelt es sich um eine Microsoft Access Datenbank, die drei Hauptfunktionen zur Verfügung stellt.

Wie beschrieben ist die Microfluidic-Workstation ein pulsweitenmodulierter HF-Generator, dessen effektive Leistung über das Tastverhältnis gesteuert wird. Zur Kalibrierung misst man zunächst die Peak-Peak Amplitude U_{PkPk} der Grundschiwingung und rechnet sie in die Maximal-Leistung P_{max} wie folgt um:

$$P_{max} = \frac{U^2}{R} = \frac{U_{PkPk}^2}{400} \text{ W} \quad (3.3)$$

Die aktuell abgegebene Leistung bestimmt man aus dem Tastverhältnis t :

$$P = P_{max} t \quad (3.4)$$

Das Tastverhältnis kann mit dem Oszilloskop für jede Spannungseinstellung der analogen Ausgänge des C-Control ermittelt und in einer Kalibriertabelle eingetragen werden. In der Transducer-Steuerung wird der Verlauf der Kalibrierkurve und ihrer Umkehrfunktion mit Polynomen siebten Grades approximiert. Das geschieht durch Anbindung von GNU-Plot über ein Interface in Form eines einzubindenden ActiveX-Objekts. Die so erhaltenen Kalibrierkurven werden benötigt, damit die vom Benutzer gewünschte Leistung korrekt vom C-Control eingestellt wird.

Um reproduzierbare Experimente durchführen zu können, bietet die Transducer-Steuerung in Abb. 3.5A die Funktion der „Transducer-Programme“. In der GNU-Plot-Syntax kann pro Kanal eine Funktion mit Parametern (1) definiert werden. Diese Funktion wird über das ActiveX-Objekt in GNU-Plot zeitlich diskretisiert (2) und als Grafik zur

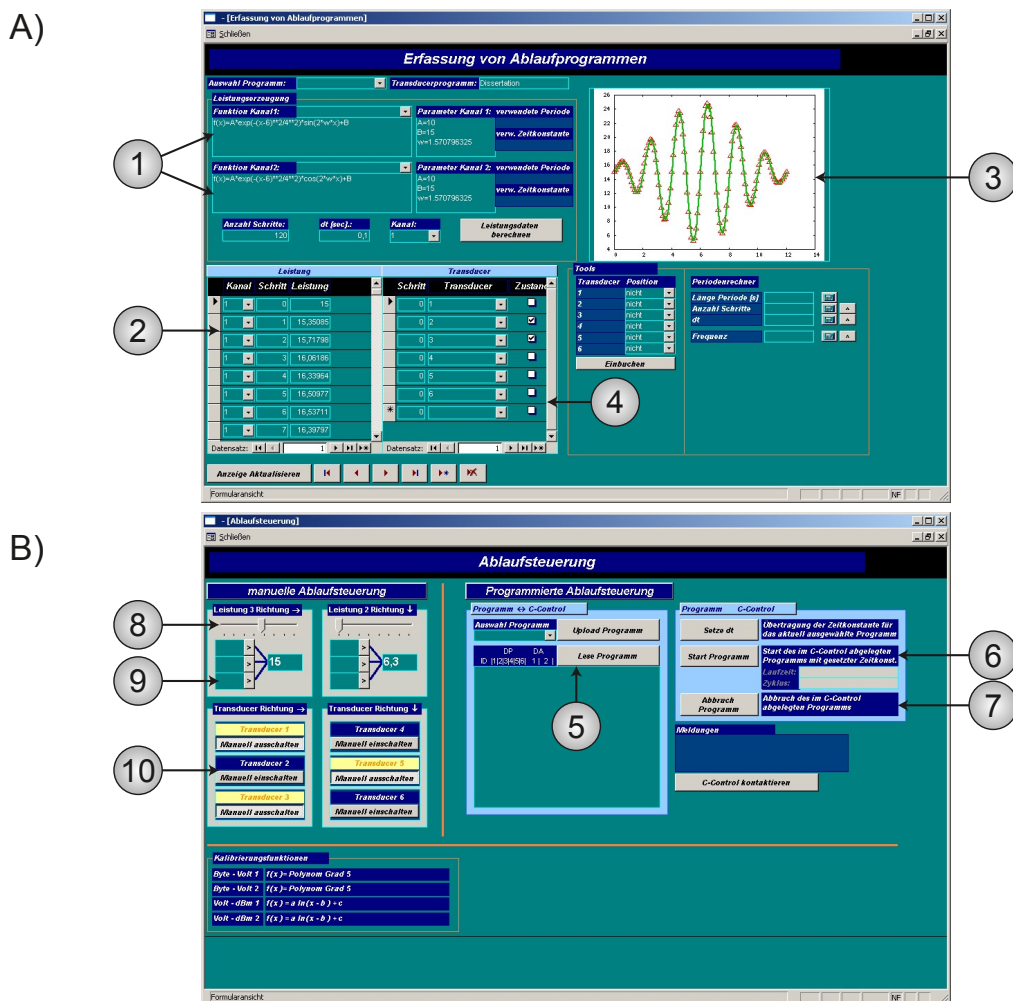


Abbildung 3.5 (A) Ablaufprogramme können in diesem Menu diskretisiert und gespeichert werden. **(B)** Die Steuerung der IDTs kann entweder manuell oder durch ein Ablaufprogramm erfolgen (Erklärung der Nummern im Text).

Kontrolle angezeigt **(3)**. Die Taktung des C-Control Mikroprozessors bewirkt dabei eine minimale zeitliche Diskretisierung von 0.02 s. Die Schaltzustände der Leistungsschalter können über das Panel **(4)** zeitlich variiert werden. Außer den Leistungsgrenzen der Microfluidic-Workstation sind dem Benutzer somit keine kreativen Grenzen gesetzt.

Die minimale zeitliche Auflösung wird wie erwähnt vom C-Control mit 0.02 s vorgegeben. Da die serielle Schnittstelle zu langsam für eine Abarbeitung des Programmes auf dem Rechner ist, können die Programme im Menu Abb. 3.5B in den C-Control geladen werden **(5)**. Dieser besitzt einen EEPROM-Speicher, in dem das Programm abgelegt wird. Somit wird vom Rechner nur noch der Start-Befehl **(6)** gegeben, der Rest wird vom C-Control endlos ausgeführt bis der Abbruch **(7)** erfolgt. Alternativ können die IDTs auch manuell bedient werden. Dazu gibt es jeweils einen Schieberegler **(8)** und drei Felder zur Leistungseinstellung des Kanals **(9)**, sowie sechs Schaltflächen zum Schalten der Leistungsschalter **(10)**.

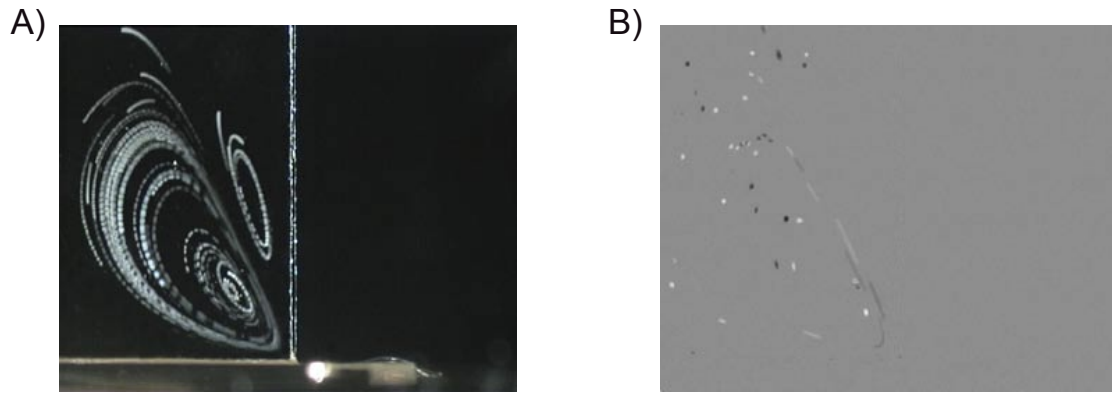


Abbildung 3.6 (A) Durch Überlagerung der Frames eines Films werden Strömungen visualisiert. (B) Zur Ermittlung der Teilchengeschwindigkeiten wird der erste Frame des Films abgezogen. Alle stationären Elemente werden grau, die beweglichen Elemente weiß und deren Anfangspositionen schwarz.

3.1.6 Die Mikroskop-Einheit

Die Verfolgung der Chip-Vorgänge erfolgt über ein HUND Auflichtmikroskop mit verschiedenen Objektivensätzen. Durch seine modulare Bauweise erlaubt es vielfältige Betrachtungsarten. Es stehen eine HBO100 Quecksilberdampfampe für Fluoreszenzmikroskopie und eine Halogenlampe für gewöhnliche Mikroskopie zur Verfügung. Je nach Betriebsmodus lässt sich am Mikroskop ein Texas Red- oder FITC-Filtersatz für Fluoreszenz- oder ein nachträglich integrierter halbdurchlässiger Spiegel für gewöhnliche Mikroskopie in den Strahlengang einbringen (Grundlagen der Fluoreszenzmikroskopie in Anhang A.8). Zur Aufnahme kann eine hochauflösende Hamamatsu C8484-05C digital-CCD Kamera (Graustufen) oder eine JVC TK-C1381 PAL Kamera (Farbe) angebracht werden. Im Fall der Hamamatsu Kamera werden die aufgenommenen Frames auf dem Rechner von der Software Openbox 1.74 [Schilling99, Keller01] über die Framegrabber Karte ausgelesen und im Raid0 verteilt auf zwei Festplatten geschrieben, um den Datenstrom komplett abspeichern zu können. Die Speicherung erfolgt ohne Komprimierung, wodurch die Originaldaten erhalten bleiben. Die Movies der JVC TK-C1381 werden über einen JVC HR-DVS3 Videorekorder digitalisiert und an der Firewire-Schnittstelle eingelesen.

3.1.7 Strömungsprofile und Particle-Tracking

Zur Visualisierung von Strömungen werden leuchtende Spurpartikel (*Beads*) mit einheitlichem Radius r_P zur Flüssigkeit hinzugefügt. Nach der Aufzeichnung der Strömung werden die einzelnen Frames des Films in Adobe Premiere 1.5 überlagert. Das Endbild ergibt sich durch pixelweise Maximums-Berechnung aus allen betrachteten Frames. Ein solches Strömungsprofil ist in Abb. 3.6A dargestellt. Die Beadgröße richtet sich dabei nach den Auswertungszielen. Sollen nur die Strömungslinien angezeigt werden, so kann die Teilchengröße auf ein Kamerapixel reduziert werden, um den Einfluss auf die Strömung zu minimieren.

Soll die Geschwindigkeit der Teilchen berechnet werden, benötigen die Programme mindestens 4×4 -Pixel Beads. Die Software Openbox 1.74 bietet eine Reihe von Algorithmen zur effizienten Verfolgung von Beads an. Für die Verfolgung von langsamen Teilchen empfiehlt sich die Verwendung eines kombinierten Korrelations- und 2d-Gauß-Algorithmus. Das Abstrahlungsprofil der kugelförmigen Beads wird mit einem Gauß-Fit approximiert und im nächsten Frame mit dem Korrelations-Algorithmus aufgespürt. Sobald die Teilchen zu schnell werden, mittelt die Kamera ein helles Kugelteilchen zu deutlich dunkleren stabförmigen Profilen entlang der Strömung. Damit lassen sich lediglich mit einem Korrelations-Algorithmus Ergebnisse erzielen, weil durch den Bezug auf den vorherigen Frame veränderte Formen in Grenzen wiedererkannt werden. Hierbei wird durch die Algorithmus-Einstellungen und manuell vom Experimentator überwacht, dass der Algorithmus nicht auf benachbarte, ähnlich aussehende Teilchen umschaltet. Zur Vereinfachung des Trackings wurde in Openbox 1.74 der erste Frame eines Films bei allen abgezogen. Dadurch erscheinen alle ortsfesten Bestandteile des Films grau und nur bewegliche Komponenten werden noch angezeigt (siehe Abb. 3.6B).

3.2 Präparation von Mikrofluidik-Chips

Die aktive Fläche der Mikrofluidik-Chips, die in dieser Arbeit eingesetzt werden, beläuft sich auf einen Kreis von etwa 9 mm Durchmesser. Ist man somit im Besitz einer Apparatur zur Verkleinerung um einen Faktor 30, so können DIN A4 oder geringfügig größere Vorlagen verwendet werden. Im folgenden Abschnitt werden die diesbezüglich entwickelten Komponenten zur Chip-Herstellung vorgestellt.

3.2.1 Maskenherstellung

Die Strukturbreiten der Elemente eines Mikrofluidik-Chips variieren zwischen etwa $5 - 10 \mu\text{m}$ für die Finger eines IDTs, über $50 - 100 \mu\text{m}$ für elektrische Zuleitungen bis zu Flächenelementen mit Ausdehnungen von $0.5 - 2 \text{ mm}$. Dieser Größenbereich wird nicht von einem Maskentyp und einer Herstellungsmethode abgedeckt, vielmehr sind spezialisierte Konzepte notwendig.

Da sich die Anordnung der IDTs und Fluidreservoirs und damit Zuleitungen etc. für verschiedene Testlayouts eines Chips grundlegend unterscheiden, kommen hier preiswerte Masken zum Einsatz, deren Auflösung beschränkt ist und die nicht zur Chip-Massenproduktion geeignet sind. Als Material verwenden wir den hochauflösenden Schwarz-Weiß Kleinbildfilm Gigabitfilm 135/36 - ISO 40/17 DIN. Als Vorlage benötigt man einen kontrastreichen Druck des Chip-Layouts auf Transparentfolie, die von einer Spiegelreflexkamera im Gegenlicht eines Tageslichtprojektors abfotografiert wird (siehe Abb. 3.7).

Im Tageslichtprojektor (1) (K-Media Professional 400) wird die Lampe durch eine Quecksilber-Dampflampe (hier: (2) OSRAM HQL-R DE LUXE 80W mit Vorschaltgerät (3) VOSSLOH SCHWABE Q80/50.551) ersetzt. Deren Spektrum enthält die starke

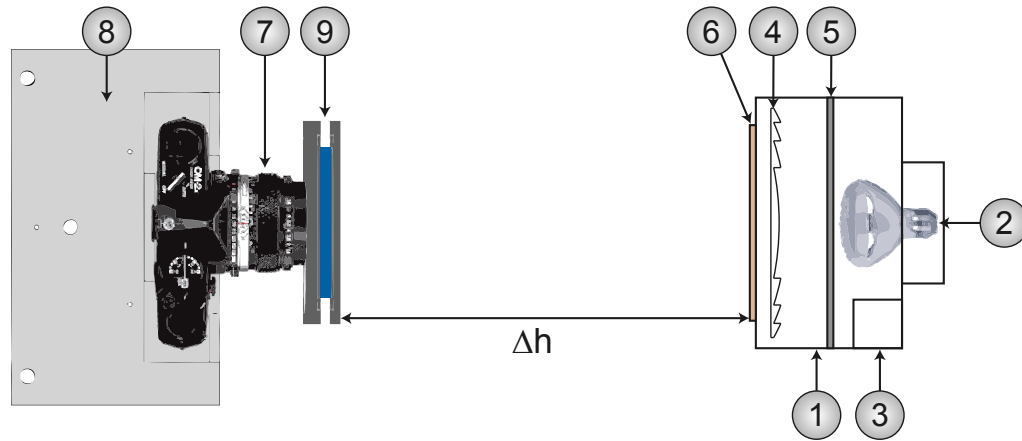


Abbildung 3.7 Aufbau der Belichtungsapparatur für Fotofilm-Masken (Darstellung um 90° gedreht): (1) Tageslichtprojektor, (2) Quecksilberdampflampe, (3) Vorschaltgerät, (4) Fresnel-Linse, (5) Diffusorfolie, (6) Vorlage auf Transparentfolie, (7) Spiegelreflexkamera, (8) Halterung zur Befestigung an Gerüst, (9) Filtereinheit.

Hg g-Linie bei $\lambda = 435 \text{ nm}$, bei der unser optischer Lack für Fotolithografie belichtet wird. So kann im Prinzip in der Kamera statt des Fotofilms auch eine Chrommaske mit optischem Lack belichtet werden. Zwischen der Lampe und der Fresnel-Linse (4) des Projektors wird eine Diffusorfolie (5) eingefügt, die verhindert, dass ein ausgeprägtes Lampenabbild auf dem Film sichtbar ist. Die Vorlage auf Folie (6) wird auf dem Projektor platziert und mit einer Plexiglasplatte abgedeckt. Die eigentliche Verkleinerung übernimmt die Kamera (7) OLYMPUS OM-2n mit 28 mm Weitwinkelobjektiv, die mit einer Halterung (8) am Vergrößerer DURST Laborator 54 befestigt ist. Die Optik des Vergrößerers wurde entfernt, sodass er lediglich als standfestes Gerüst dient. Vor der Kamera ist ein Filter (9) angebracht, der ausschließlich die Hg g-Linie transmittieren lässt. Der Verkleinerungsfaktor wird durch den Abstand Kamerafilter-Projektor Δh eingestellt, wodurch sich auch die belichtete Fläche und maximale Auflösung verändert (Details in Anhang A.10). Der belichtete Film wird dann entwickelt, fixiert und getrocknet (Parameter in Anhang A.10) und kann durch Aufkleben auf einen Glasobjektträger als Maske eingesetzt werden. Die Belichtung von optischen Lack ist im Moment nicht effizient, da die geringe Leistung der Lampe zu langen Belichtungszeiten führt.

Strukturen unterhalb von $30 \mu\text{m}$ wie z.B. IDTs werden mit dem Elektronenstrahlschreiber RAITH eLine in PMMA-Lack auf Chrom beschichtete Glasmasken belichtet. Nach dem Entwickeln des Lacks kann das Chrom geätzt werden und man erhält präzise Masken mit hohem Kontrast, die praktisch beliebig oft wieder verwendet werden können. Für das Design von IDTs findet hier das Programm „IDT Berechnung DXF.nb“ in Mathematica 4.0 Anwendung, in dem verschiedene Varianten von IDTs parametrisiert und als DXF-Format ausgegeben werden können. Nach der Konvertierung dieser Datei in das Format GDSII kann es direkt in der Software des RAITH eLine eingelesen werden.

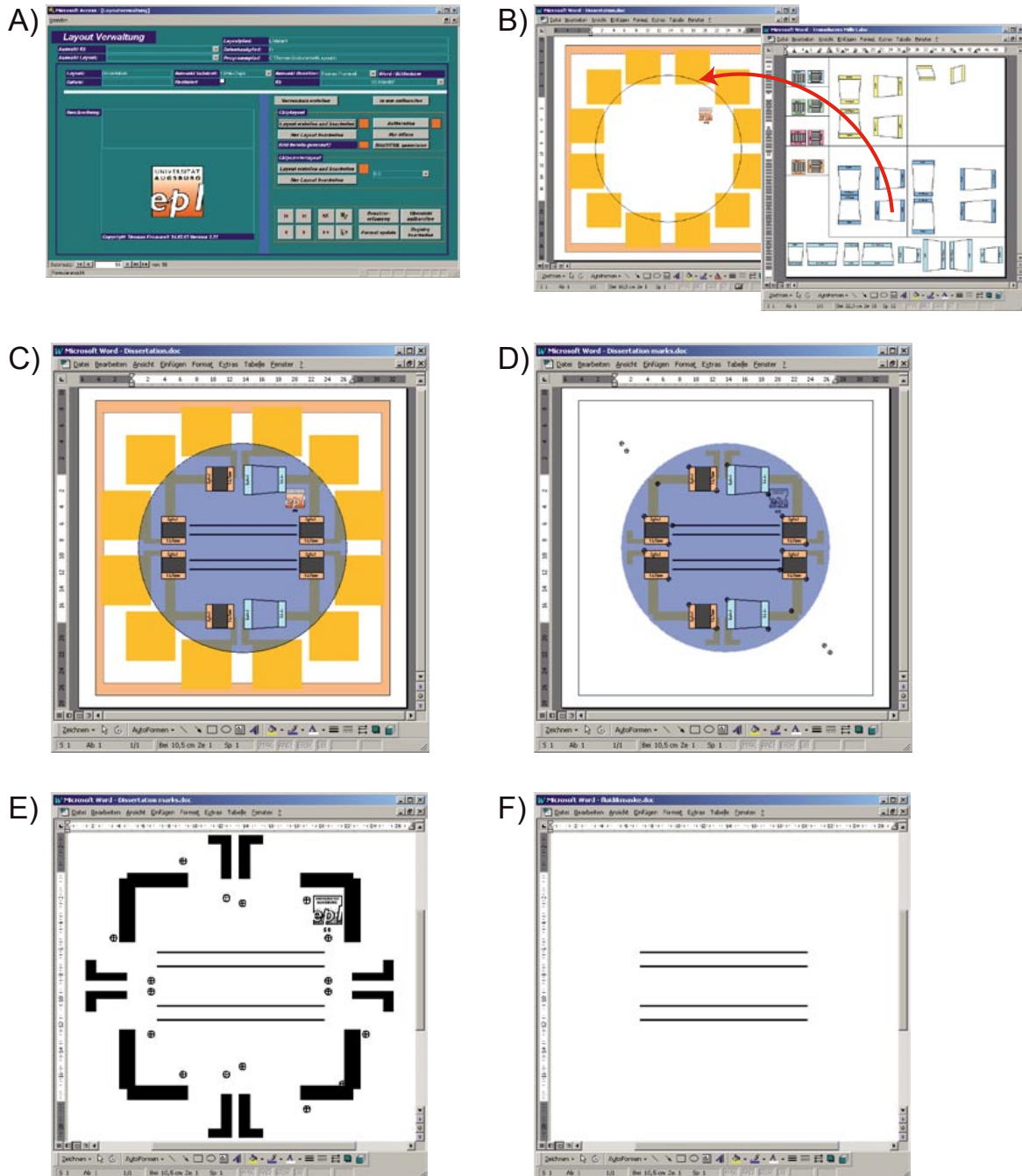


Abbildung 3.8 Der Ablauf des Chip-Designs: (A) Das Hauptmenu der Layoutverwaltung beinhaltet die charakteristischen Informationen eines Designs und bereits vollzogene Schritte. (B) In Word werden Chip-Layouts mit Zeichnungselementen gestaltet und maßstabsgetreue IDTs als Platzhalter hinzukopiert. (C) Das fertige Chip-Layout im Verhältnis 30 : 1 muss für die Maskenherstellung noch aufbereitet werden. (D) Die aufbereitete Version enthält nur noch wesentliche Elemente und fügt Positioniermarken ein. Der Benutzer bereitet dann die Positioniermaske (E) und die Fluidik-Maske (F) auf.

3.2.2 Chip-Design

Die Effizienz bei der Entwicklung von Labs-on-a-Chip hängt nicht unwesentlich vom Aufwand des Designs und der Herstellung von Chips ab. Um also schnell präzise Vorlagen für Fotofilm-Masken zur Verfügung zu stellen, wurde die „Layoutverwaltung“ konzipiert und in Microsoft Access programmiert.

Die Layoutverwaltung ist eine Datenbank, in der Chip-Layouts für Fotofilm-Masken gezeichnet und verwaltet werden. Ein typischer Entwurf startet im Hauptmenu Abb. 3.8A mit der Auswahl eines der am Lehrstuhl gängigen Substrate. Einem neuen Layout wird eine laufende Nummer zugewiesen und automatisch ein Word-Dokument im Maßstab 30 : 1 erzeugt, das bereits das Substratmaterial und Identifizierungsnummer enthält. Am Lehrstuhl als Masken vorhandene IDTs können als maßstabsgetreue Zeichnungsobjekte aus einer Palette in das neue Layout kopiert werden, wo sie als Platzhalter fungieren (Abb. 3.8B). Zuleitungen und andere Elemente werden mit den Word-Zeichnungselementen an der entsprechenden Stelle gezeichnet. Das so entstandene Layout Abb. 3.8C ist allerdings noch nicht geeignet für die Produktion von Masken. Die Layoutverwaltung bereitet das vom Benutzer gezeichnete Design auf, indem es alle relevanten Objekte in ein neues Dokument transferiert und mit Positioniermarken eingrenzt (Abb. 3.8D). Diese Elemente können nun vom Benutzer schwarz/weiß gestaltet und als einzelne Vorlagen exportiert werden. Die als Platzhalter eingefügten IDT-Objekte werden entfernt, da IDTs mit Chrom-Masken belichtet werden. Man zerlegt das Design in eine *Positioniermaske* mit Zuleitungen der IDTs und Positioniermarken für die spätere Positionierung von Elementen, welche mit Chrom-Masken hergestellt werden (Abb. 3.8E). Außerdem benötigt man noch eine *Fluidik-Maske* zur späteren Definition der hydrophilen Bereiche (Abb. 3.8F). Die fertigen Masken werden je nach Größe auf DIN A4 oder DIN A3 Transparentfolie doppelt ausgedruckt und übereinandergeklebt, um genügend Kontrast im Gegenlicht des Tageslichtprojektors zu bieten. Alternativ kann auch der Druck auf Offset-Folie erfolgen, die aufgrund ihrer hohen Auflösung und perfektem Kontrast erheblich teurer ist. Diese Vorlagen eignen sich nun zur Herstellung von Fotofilm-Masken nach Kapitel 3.2.1.

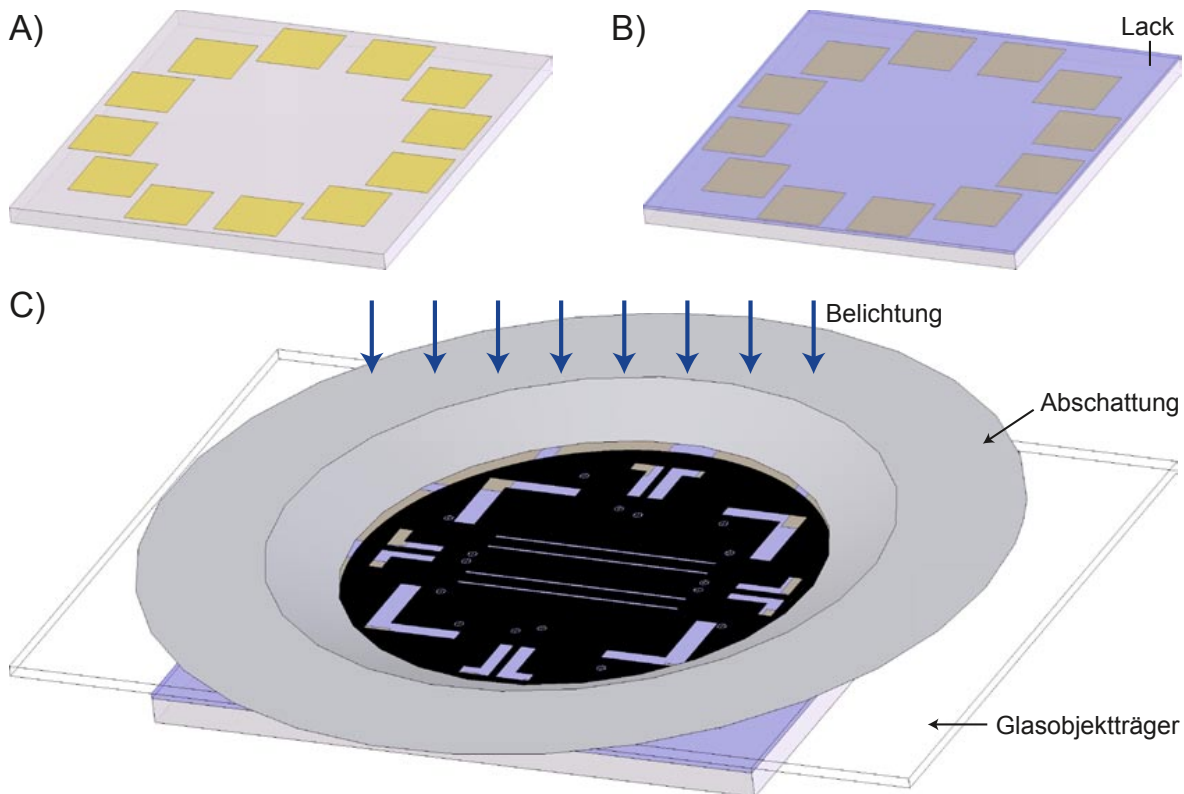


Abbildung 3.9 (A) Gereinigtes Substrat mit zwölf Kontaktflächen. (B) Mit optischem Positivlack beschichtetes Substrat. (C) Belichtung des Lacks mit $\varnothing 9$ mm Positioniermaske (Fotofilm auf Glasobjektträger) und einer Abschattung für die umgebenden Bereiche.

3.2.3 Chip-Herstellung

In diesem Abschnitt wird die Herstellung von planaren Mikrofluidik-Chips erklärt, wie sie in dieser Arbeit eingesetzt werden. An dieser Stelle werden nur die Schritte illustriert, die entsprechenden Betriebsparameter befinden sich in Anhang A.9. Die Erklärung erfolgt anhand des Designs, das im vorigen Kapitel 3.2.2 gezeichnet wurde.

1. **Reinigung:** Bei der Reinigung des Substrats (bereits mit zwölf Kontaktflächen versehen) werden organische Verunreinigungen wie Lackreste und Partikel vom Sägen der Wafer entfernt (Abb. 3.9A).
2. Aufschleudern eines optischen Positivlacks zur Fotolithografie mit einer Dicke von ca. $1.3\ \mu\text{m}$ (Abb. 3.9B). Dieser kann mit sichtbarem Licht (im wesentlichen der g-Linie des Quecksilbers) belichtet werden.
3. **Belichtung der Grundstrukturen:** Die Positioniermaske auf Fotofilm wird auf einem Glasobjektträger fixiert und mit einer Abschattung der äußeren Bereiche im Maskaligner eingebaut. Am Maskaligner wird die Maske über dem Substrat positioniert, angepresst und belichtet (Abb. 3.9C).
4. Das Entwickeln eines Positivlacks löst fast ausschließlich belichtete Regionen ab. Dadurch erhält man auf dem Substrat eine Lackmaske, in der die Positionier-

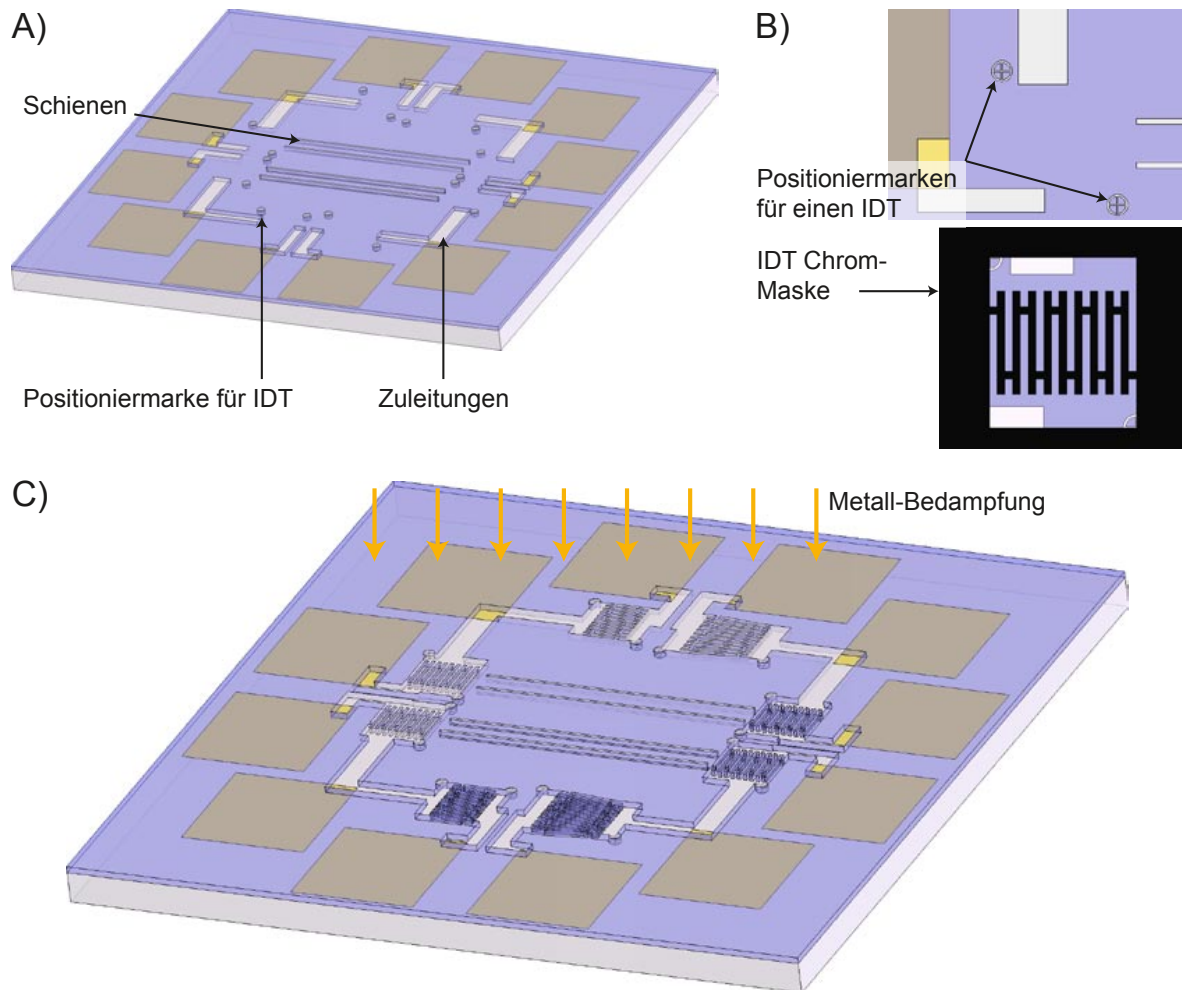


Abbildung 3.10 (A) Der entwickelte Lack zeigt die Grundstrukturen, wie Zuleitungen und Positioniermarken für IDTs oder die Schienenelemente. (B) Die Positioniermarken erlauben die exakte Platzierung von Elementen, die mit Chrom-Masken belichtet werden müssen. (C) Auf der fertigen Lackmaske sind alle Strukturen des Chips freigelegt, die in der Aufdampfanlage metallisiert werden.

marken für feinere Strukturen wie IDTs erkenntbar sind (Abb. 3.10A). Nach Austrocknung des vom Lack aufgesogenen Entwicklers folgt der nächste Belichtungsschritt.

5. **Belichtung der feinen Strukturen:** Die feinen Strukturen wie z.B. IDTs werden mit Chrom-Masken belichtet. Dazu wird die Maske über den entsprechenden Positioniermarken platziert, angepresst und belichtet (Abb. 3.10B).
6. **Metallisierung:** Nach der erneuten Entwicklung des Fotolacks enthält die Lackmaske alle Strukturen des Layouts, die metallisiert werden müssen (Abb. 3.10C). Daraufhin wird die Lackmaske mit Sauerstoffplasma behandelt, um in den entfernten Bereichen letzte Lackreste zu oxidieren. Dies ermöglicht die Haftung der Metallschicht, die im Elektronenstrahlverdampfer aufgebracht wird. Sie besteht aus einem Schichtsystem Titan-Gold-Titan (Dicke ≈ 100 nm). Titan dient als Haftvermittler zum Substrat und der im Schritt (9) aufgedampften SiO-Schicht.

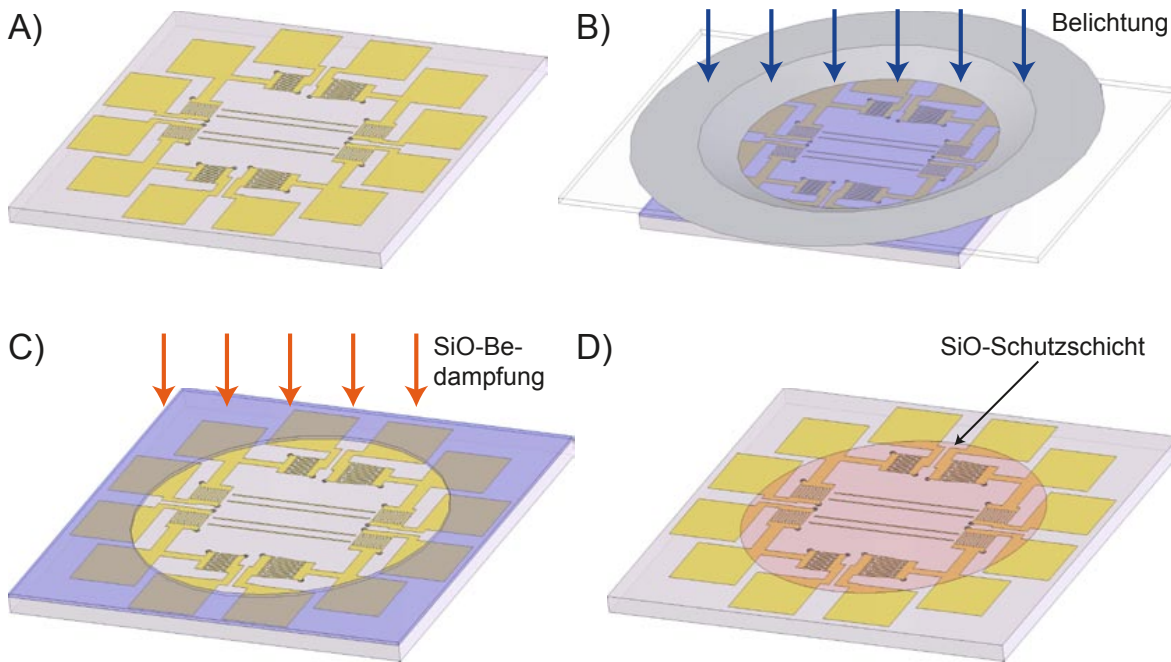


Abbildung 3.11 (A) Nach dem Entfernen der Lackschicht verbleiben die metallisierten Strukturen auf dem Substrat. (B) Auf einer neuen Lackschicht wird eine Kreisfläche mit der Abschattung belichtet. (C) Nach dem Entwickeln wird diese Fläche mit SiO bedampft. (D) Die so entstehende Schicht schützt die IDTs und eignet sich zur Modulation der Benetzungseigenschaften.

7. Danach wird der Lack im Lösungsmittel unter Ultraschall mitsamt der darauf deponierten Metallschicht entfernt (*Lift-Off*), wodurch nur die gewünschten Strukturen auf dem Substrat zurückbleiben (Abb. 3.11A).
8. **Belichtung der Schutzschicht:** Zunächst wird eine neue Lackschicht aufgeschleudert. Dann wird eine Kreisfläche (Durchmesser ca. 9 mm) mit der Abschattung aus Schritt (3) belichtet und entwickelt (Abb. 3.11B).
9. **Aufdampfen der Schutzschicht:** Die Lackmaske wird wieder mit einem Sauerstoffplasma gereinigt und dann in der Aufdampfanlage thermisch mit SiO (Dicke ≈ 160 nm) bedampft (Abb. 3.11C).
10. Nach dem Entfernen des Lacks im Lösungsmittel unter Ultraschall (*Lift off*) steht nun eine isolierende Schutzschicht für die Strukturen zur Verfügung, die Spannung tragen (Abb. 3.11D). Außerdem lassen sich die Benetzungseigenschaften der SiO-Schutzschicht verändern.
11. **Benetzungsmodulation (hydrophob):** Nach der Reinigung der Oberflächen mit einem Sauerstoffplasma werden die Substrate mit einer Monolage Oktadecyltrichlorsilan (*OTS*) beschichtet. OTS bildet kovalente Si – O – Si Bindungen mit den Oberflächenatomen der SiO-Schutzschicht, sodass sich die langen Alkanketten in einer dichten Packung anordnen und eine hydrophobe Oberfläche erzeugen.

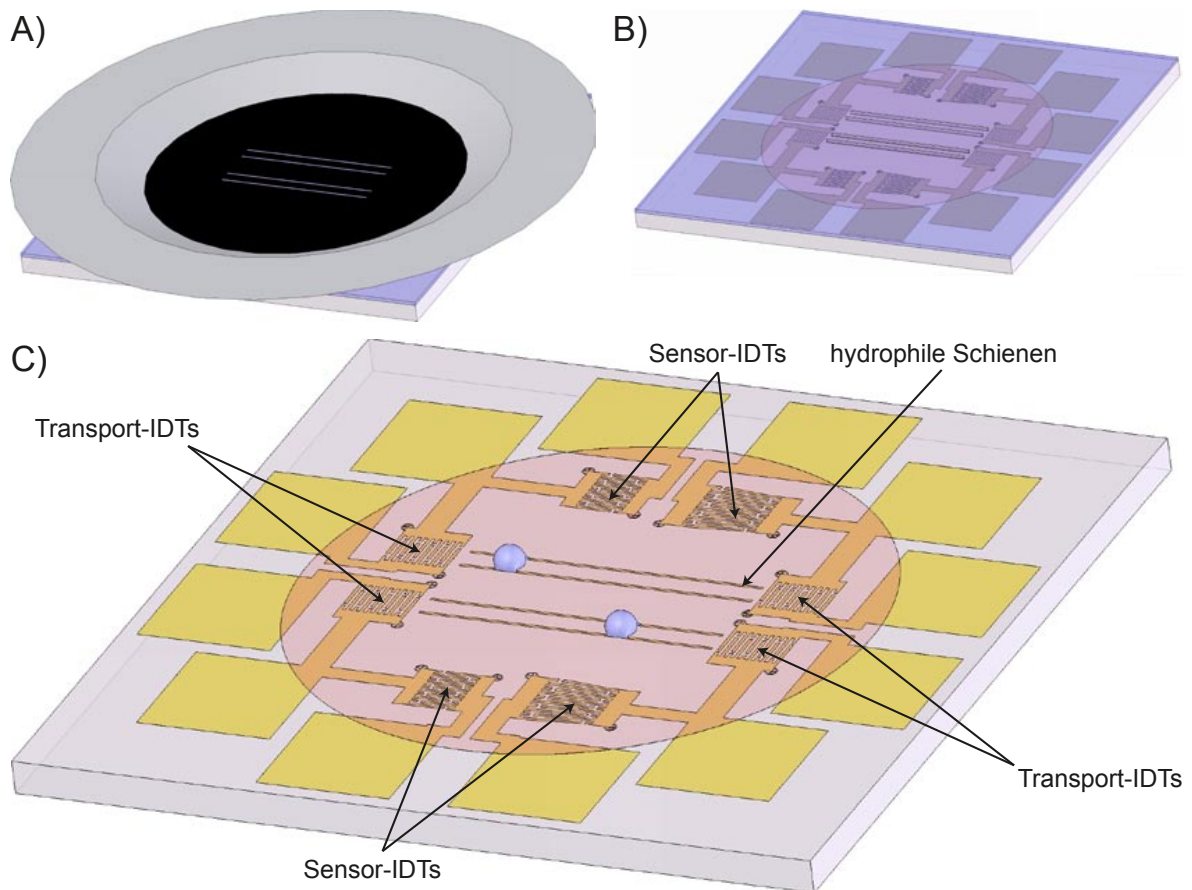


Abbildung 3.12 (A) Belichtung des Lacks mit Fluidik-Maske und Abschattung. (B) Nach dem Entwickeln kann dieser Bereich mit einem Sauerstoffplasma hydrophil gestaltet werden. (C) Der fertige Chip kann zwei Tropfen auf Schienen mit Transport-IDTs vorwärts und rückwärts schieben und die Position mit den Sensor-IDTs ermitteln.

12. Die Oberfläche wird erneut belackt und dann mit der Fluidik-Maske im Mask-aligner belichtet. Die Maske befindet sich auf Fotofilm, wird auf einem Glasobjektträger fixiert und durch die Abschattung ergänzt (Abb. 3.12A).
13. **Benetzungsmodulation (hydrophil):** In der entwickelten Struktur sollen nun die hydrophilen Bereiche definiert werden (Abb. 3.12B). Dazu wird der Lack erneut mit einem Sauerstoffplasma behandelt, wodurch in den belichteten Bereichen letzte Lackreste und die Monolage OTS oxidiert werden. Dadurch kommt in diesem Bereich wieder die hydrophile SiO-Schicht zum Vorschein.
14. **Einsatz:** Nachdem der Lack mit Lösungsmittel entfernt wird, ist der Chip einsatzbereit (Abb. 3.12C).

In diesem Fall sind die hydrophilen Zonen Schienen, die einen Tropfen im Schallpfad halten, während er von IDTs auf dem hydrophoben Untergrund haftungsarm transportiert wird. Auf dem hergestellten Chip in Abb. 3.13A kann die Position eines Tropfens entlang der Strecke mit der Verzögerungsleitung durch TIDTA und TIDTB sensorisch erfasst werden (vgl. Abb. 3.13B und ortsbestimmung.mov auf DVD). Dieses Design zeigt auf, welche komplexen Strukturen mit Aktorik und Sensorik auf den vordefinierten Substraten mit zwölf Kontaktflächen realisierbar sind. In dieser Arbeit wird die Anwendung des Tropfentransports nicht eingehender verfolgt. Stattdessen wird die Flüssigkeit nur in den hydrophilen Bereichen platziert und durch die hydrophobe Umgebung begrenzt. Die Benetzungsmodulation mit OTS erweist sich dabei als erstaunlich leistungsfähig. Die Fluidik-Bahnen können relativ frei gestaltet werden, solange der Durchmesser entlang der Fluidik-Bahn nicht soweit reduziert wird, dass an der Engstelle die Verbindung aufgrund der Oberflächenspannung abreißt. Dadurch sind nicht nur gewöhnliche freie Kanalstrukturen wie in Abb. 3.13C möglich, sondern auch komplexere Strukturen wie die Ausbuchtungen in Abb. 3.13D oder eine rechtwinklige Ecke in Abb. 3.13E. Dies ermöglicht den Aufbau von komplexen Kanalstrukturen für Lab-on-a-Chip Anwendungen, die von außen zur Befüllung frei zugänglich sind. Außerdem erfordern Wände zusätzlich Energie für den Transport der Flüssigkeit, da diese an der Wand abgebremst wird (siehe Randbedingungen (4.62) in Kapitel 4.4.4).

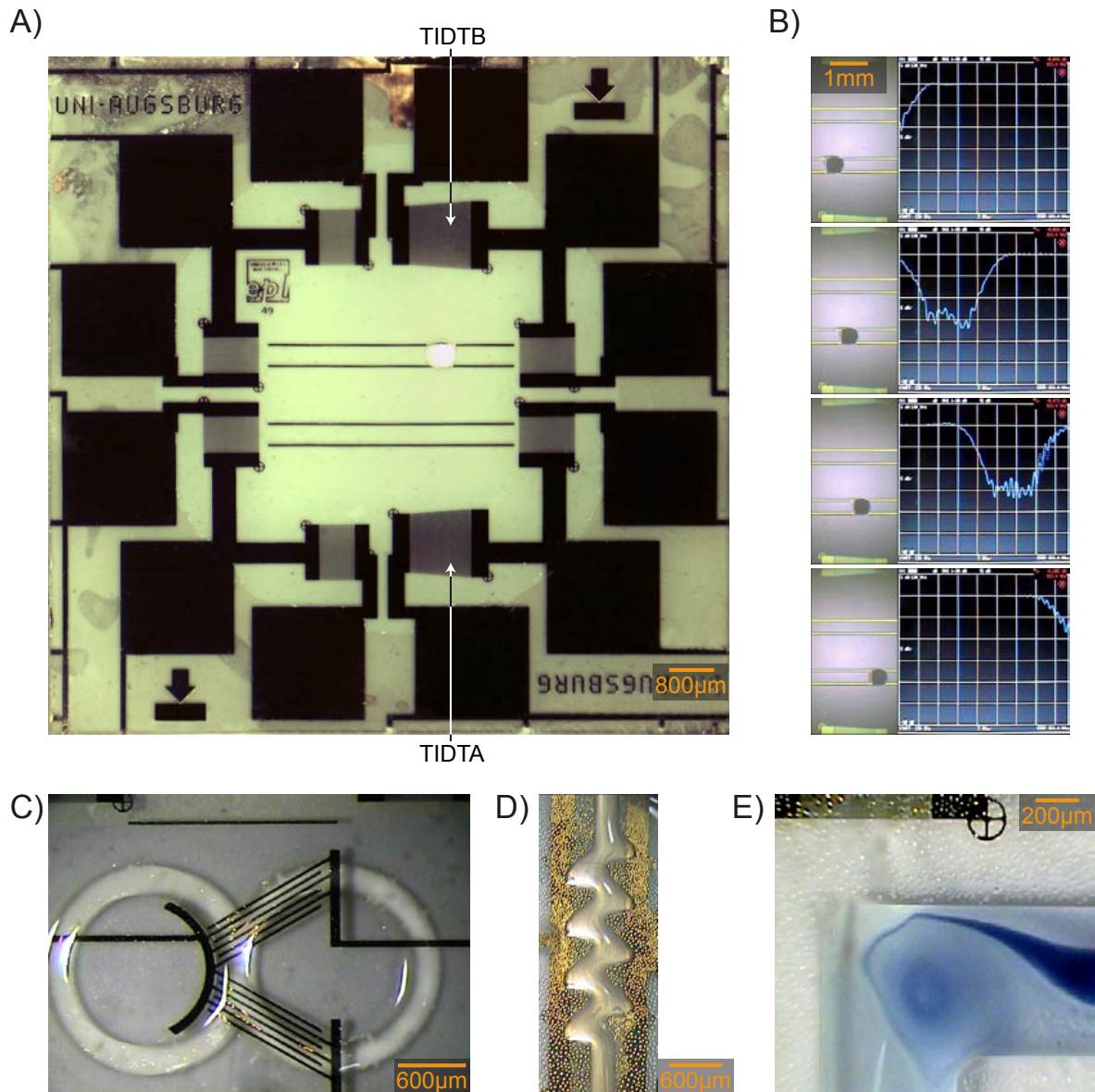


Abbildung 3.13 (A) Draufsicht des hergestellten Chips, dessen Schienen mit einem Tropfen befüllt sind. Die Verzögerungsleitung durch TIDTA und TIDTB kann die Tropfenposition bestimmen (vgl. ortsbestimmung.mov auf DVD). (B) Bildstrecke der sensorischen Erfassung der Tropfenposition auf dem Beispielchip (vgl. Abb. 3.12C): Im rechts dargestellten Transmissionsspektrum der Verzögerungsleitung ergibt sich Dämpfung um eine Frequenz, die nach Gl. (2.21) die Tropfenposition identifiziert. Benetzungsmodulation mit OTS: (C) Kanalströmung mit freier Oberfläche in Form einer Acht. (D) Ausbuchtungen in Fluidkanälen. (E) Rechtwinklige Ecke in einer Kanalströmung.

Kapitel 4

SAW-Fluidik in drei Dimensionen

Bis in das 19. Jahrhundert wurde die Hydrodynamik als rein theoretisches Forschungsgebiet von Mathematikern und Physikern betrachtet. Damals hatte Euler eine Gleichung zur Beschreibung widerstandsloser Flüssigkeiten abgeleitet. Aufgrund der enormen Abweichungen von der Realität viskoser Flüssigkeiten verließen sich die Hydrauliker jedoch auf ihre empirischen Formeln zur Berechnung von Schiffswiderständen und Rohrströmungen. Anhand mikroskopischer Überlegungen fügte C. L. Navier im Jahr 1822 der Euler-Gleichung einen viskosen Term zu [Darrigol05]. Die sog. Navier-Stokes-Gleichung beschreibt die Fluidik gänzlich, erlaubt aber aufgrund ihrer Nichtlinearität nur in seltenen Fällen die analytische Lösung eines Problems. Bei der numerischen Lösung durch die Methode der finiten Elemente (*FEM*) diskretisiert man komplexe Geometrien und transformiert die Lösung der Differentialgleichung auf die Lösung eines linearen Gleichungssystems in den Knotenpunkten der Gitterelemente. In Verbindung mit der heutigen Rechnerleistung ist so prinzipiell eine effektive und präzise numerische Berechnung von Strömungsprofilen möglich. Dieses Kapitel zeigt die Ansätze und Schwierigkeiten bei der Simulation des Acoustic Streaming.

4.1 Theoretische Grundlagen der SAW-Fluidik

4.1.1 Anregung von Schallwellen im Wasser

In Kapitel 2.9 wurde bereits erörtert, dass die SAW in einem Oberflächenmedium ausreichender Dicke akustische Longitudinalwellen erzeugt. Diesen sei hier die Aufmerksamkeit gewidmet, da sie die Intensität von angeregten Scherwellen bei weitem übersteigen (vgl. Gl. (2.32), (2.33), (2.34) und (2.35) sowie [Strobl05] S79).

Nach dem Huygenschen Prinzip lässt sich die SAW als eine Reihe phasenverschobener Punktoszillatoren betrachten. Wie in Abb. 4.1A dargestellt wird dadurch eine ebene Wellenfront in der Flüssigkeit erzeugt, die unter dem Rayleigh-Winkel θ_R abgestrahlt wird. Dieser errechnet sich aus dem vom Schall auf dem Substrat und in der Flüssigkeit zurückgelegten Weg zu:

$$\sin(\theta_R) = \frac{v_{Fluid}}{v_{SAW}} \quad (4.1)$$

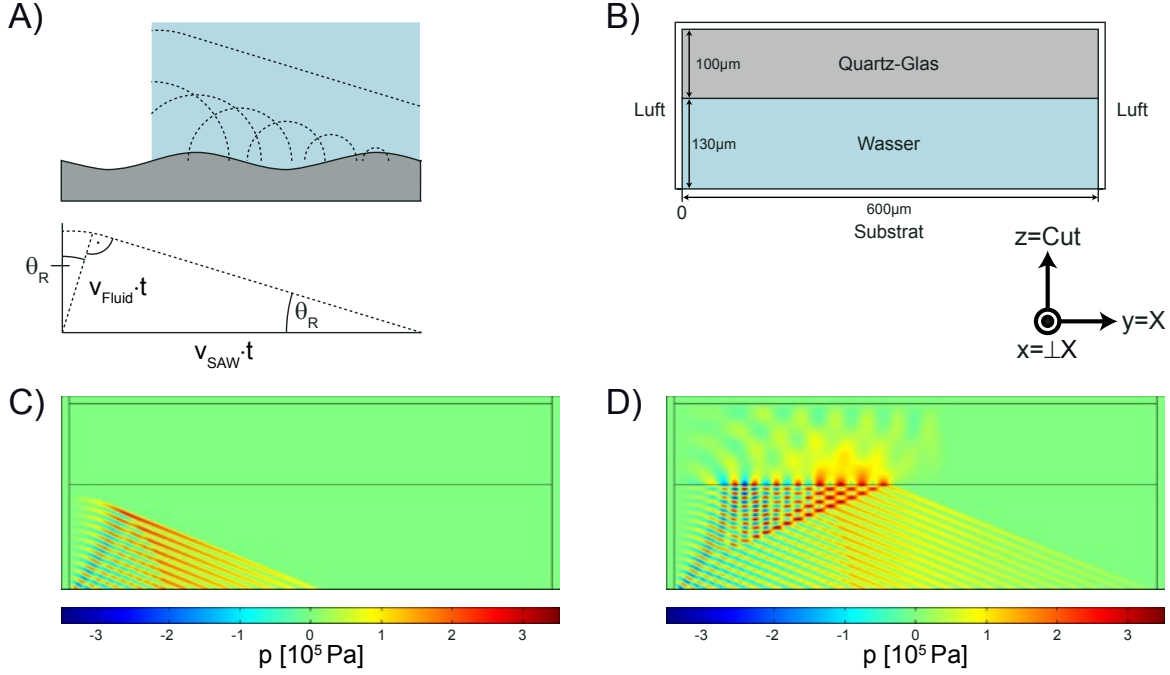


Abbildung 4.1 (A) Die SAW als eine Reihe von phasenverschobenen Punktoszillatoren erzeugt ein ebene Wellenfront in der Flüssigkeit. Der Rayleigh-Winkel θ_R kann durch einfache Trigonometrie bestimmt werden. (B) Ein typisches Fluid-Reservoir besteht aus dem Wassergebiet selbst, abgedeckt durch einen Quartz-Glasdeckel, und ist an den Seiten umgeben von Luft. (C) Die FEM-Simulation der Druckwellen bei $t = 80 \text{ ns}$ bestätigt die Modellvorstellung nach dem Huygenschen Prinzip (Substrat LiNbO_3 128° rot Y-Cut, vgl. Abb. 2.2). Der Verlust an die umgebende Luft ist in linearer Darstellung nicht mehr auflösbar. (D) Die Wellenfront wird am Glasdeckel reflektiert ($t = 150 \text{ ns}$).

Zur Verifizierung dieser Modellvorstellung dient eine zeitabhängige FEM-Simulation der linearen Akustik mit COMSOL Multiphysics. In einem typischen Fluidreservoir (Abb. 4.1B) wird die Flüssigkeit ($i = H_2O$) nach oben durch einen Quartz-Glasdeckel ($i = \text{Glas}$) und zu den Seiten durch die Umgebungsluft ($i = \text{Luft}$) begrenzt. In den einzelnen Gebieten i gilt es die Wellengleichung für den Druck p zu lösen:

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho_i} \nabla p \right) - \frac{1}{\rho_i v_i^2} \frac{\partial^2 p}{\partial t^2} = Q \quad (4.2)$$

Hierbei bezeichnen ρ_i und v_i die Dichten und Schallgeschwindigkeiten in den entsprechenden Gebieten und Q eine Monopolquelle des Drucks, die hier Null ist. Auf der Kontaktfläche Substrat-Wasser wird der Druckgradient ∇p durch die Normal-Beschleunigung der SAW vorgegeben:

$$\vec{n} \cdot \nabla p = \rho_{\text{Fluid}} \omega^2 H(v_{\text{SAW}} t - y) A_0 \sin(k y - \omega t) \exp(-y/\kappa_{op}) \quad (4.3)$$

Die Heavyside-Funktion H bewirkt den Eintritt der Welle unter das Wasser zum Zeitpunkt $t = 0$. Die SAW erfährt durch die Energieabgabe eine exponentielle Dämpfung der Amplitude A_0 mit der Dämpfungskonstante κ_{op} . An den Grenzflächen Wasser-Luft und Wasser-Glas wird Kontinuität angenommen:

$$\vec{n} \cdot \left(\frac{1}{\rho_i} \nabla p_i - \frac{1}{\rho_j} \nabla p_j \right) = 0 \quad (4.4)$$

Abb. 4.1C zeigt die Ausbreitung der Wellenfront zum Zeitpunkt $t = 80 \text{ ns}$, die mit der Modellvorstellung nach dem Huygenschen Prinzip einhergeht. Am Glasdeckel wird die ebene Welle dann reflektiert, wie in Abb. 4.1D zur Zeit $t = 150 \text{ ns}$ erkennbar ist (vgl. anregung.mov auf DVD). Die Vorstellung der Erzeugung einer ebenen Wellenfront durch die SAW, die an den Grenzflächen reflektiert wird, ist demnach gerechtfertigt und soll als Basis für weitere Überlegungen herangezogen werden.

Die dargestellte Simulation beschreibt die Propagation einer ungedämpften Welle im Wasser. Beim Acoustic Streaming entsteht hingegen im Zeitmittel eine Strömung, die Energie aus der Welle abzieht. Die Auswirkungen des Acoustic Streaming auf die Form der Wellenausbreitung werden hier vernachlässigt, da die Wechselwirkung nur schwach ist (siehe große 1/e-Abklinglänge der Schallintensität im Wasser in Kapitel 4.2.3). Auf die entsprechenden theoretischen Hintergründe des Acoustic Streaming kann hier nicht näher eingegangen werden. Hierzu sei auf weiterführende Literatur verwiesen [Eckart48, Nyborg65].

4.1.2 Die Navier-Stokes-Gleichung

Im allgemeinen wird zur Simulation des Geschwindigkeitsfelds \vec{u} einer Flüssigkeit die Navier-Stokes-Gleichung für inkompressible Flüssigkeiten herangezogen [Morgan03]:

$$\rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \underbrace{\rho (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u}}_{\text{Trägheitsterm}} = \vec{f} - \nabla p + \underbrace{\eta \nabla^2 \vec{u}}_{\text{viskoser Term}} \quad (4.5)$$

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \quad (4.6)$$

Man gewinnt Gl. (4.5) aus Argumenten der Impulserhaltung. Auf der linken Seite steht die substantielle Ableitung des kinetischen Impulses $\rho \vec{u}$, wobei ρ als ortsunabhängige Konstante ausgeklammert werden kann. Auf der rechten Seite stehen entsprechende Kraftdichtenterme, wie der konservative Druckgradient ∇p , die Scherkräfte, die durch die Viskosität η einwirken, und externe Volumenkräfte \vec{f} . Für eine inkompressible Flüssigkeit vereinfacht sich außerdem die Kontinuitätsgleichung zu Gl. (4.6). Damit ist das Gleichungssystem für die vier Unbekannten u_i , p eindeutig bestimmt.

4.1.3 Eigenschaften der Mikrofluidik

Wenn man in der Navier-Stokes-Gleichung die Skalen der einzelnen Variablen ausklammert, ergeben die entstehenden Vorfaktoren einen Eindruck davon, welche Terme in einem System wichtig sind. Bildet man den Quotienten aus den Vorfaktoren des Trägheits- und viskosen Terms aus Gl. (4.5), so erhält man die Reynolds-Zahl Re :

$$Re = \frac{\rho u_0 l_0}{\eta} \quad (4.7)$$

Hierbei sind l_0 und u_0 die charakteristischen Abmessungen und Geschwindigkeiten des Systems. Für l_0 wird in Kanalströmungen oft der hydraulische Durchmesser D_h

[Geschke04] eingesetzt :

$$D_h = \frac{4A}{l_{wet}} \quad (4.8)$$

Diese Größe beschreibt das Verhältnis von durchflossener Fläche A zur ihrem benetzten Umfang l_{wet} . Im Fall beliebig geformter Geometrien dieser Arbeit wird für l_0 die kleinste Ausdehnung des Systems verwendet. In der Mikrofluidik gilt i.a. $Re < 1$, wodurch der Trägheitsterm in der Navier-Stokes-Gleichung (4.5) vernachlässigbar wird. In diesem Grenzfall lassen sich stationäre Strömungen durch die Stokes-Gleichung beschreiben:

$$\begin{aligned} \vec{f} - \nabla p + \eta \nabla^2 \vec{u} &= 0 \\ \nabla \cdot \vec{u} &= 0 \end{aligned} \quad (4.9)$$

Diese Gleichung ist linear in \vec{u} und erlaubt demnach Superposition.

4.1.4 Die schwache Formulierung

In Abschnitt 4.1.5 wird der Aufwand der FEM-Simulation des Acoustic Streaming durch Zeitmittelung der zeitabhängigen Lösung der kompressiblen Navier-Stokes-Gleichung [Köster06A] für 3d-Geometrien abgeschätzt. Dafür benötigt man die Grundlagen der FEM-Simulation, wie sie in gängigen FEM-Lösern implementiert sind. Anhand der Poisson-Gleichung wird das FEM-Prinzip hier erläutert [Langlotz04].

Die Poisson-Gleichung auf einem Gebiet Ω und dem Rand $\partial\Omega$ lautet:

$$-\nabla \cdot (\nabla u) = f \quad \text{in } \Omega \quad (4.10)$$

$$u = 0 \quad \text{auf } \partial\Omega \quad (4.11)$$

Die sogenannte schwache Formulierung reduziert zunächst die starke Gleichheit auf eine schwache Gleichheit. Dazu verlangt man nicht mehr punktweise Gleichheit der beiden Seiten von Gl. (4.10), sondern multipliziert beide Seiten mit einer Testfunktion $w \in X$ (X : Raum der einfach stetig differenzierbaren Funktionen, die auf dem Rand $\partial\Omega$ verschwinden) und integriert über das gesamte Gebiet:

$$-\int_{\Omega} w \nabla \cdot (\nabla u) dV = \int_{\Omega} f w dV \quad (4.12)$$

Mit partieller Integration und Gl. (4.11) erhält man:

$$\int_{\Omega} \nabla w \cdot \nabla u dV = \int_{\Omega} f w dV \quad (4.13)$$

Gesucht wird also eine Funktion $u \in X$, sodass für alle $w \in X$ die Gl. (4.13) erfüllt ist. Gl. (4.13) beschreibt ein unendlich großes Gleichungssystem und muss in der Praxis approximiert werden. Dazu beschränkt man sich auf einen endlich-dimensionalen Teilraum $X^h \subset X$ mit $u^h, w \in X^h$ und verlangt $\forall w \in X^h$:

$$\int_{\Omega} \nabla w \cdot \nabla u^h dV = \int_{\Omega} f w dV \quad (4.14)$$

In diesem endlich-dimensionalen Funktionenraum kann man die Funktion u^h durch eine endliche Basis $\{\phi_1 \dots, \phi_n\}$ darstellen:

$$u^h = \sum_{i=1}^n u_i \phi_i \quad (4.15)$$

Schließlich werden im Galerkin-Ansatz die n Basisfunktionen ϕ_j als Testfunktionen w eingesetzt:

$$\sum_{i=1}^n u_i \int_{\Omega} \nabla \phi_i \cdot \nabla \phi_j dV = \int_{\Omega} f \phi_j dV \quad (4.16)$$

Die Approximation der Funktion u berechnet man demnach aus dem linearen Gleichungssystem:

$$\mathbf{A} \vec{U}^h = \vec{F} \quad (4.17)$$

$$A_{ij} = \int_{\Omega} \nabla \phi_i \cdot \nabla \phi_j dV \quad (4.18)$$

$$\vec{U}^h = (u_1, \dots, u_n) \quad (4.19)$$

$$\vec{F} = \left(\int_{\Omega} f \phi_1 dV, \dots, \int_{\Omega} f \phi_n dV \right) \quad (4.20)$$

Die Steifigkeitsmatrix \mathbf{A} besitzt dabei n^2 Einträge, wobei die Besetzung von den Basisfunktionen abhängt. Die meisten Einträge sind jedoch Null, weshalb man von dünn besetzten Matrizen spricht.

4.1.5 Aufwand der kompressiblen Simulation der 3d-SAW-Fluidik

In [Köster06A] wurde die FEM-Simulation des Acoustic Streaming durch Zeitmittelung der zeitabhängigen Lösung der kompressiblen Navier-Stokes-Gleichung mit der Volumen-Viskosität ζ vorgestellt :

$$\rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\rho \vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} = \vec{f} - \nabla p + \eta \nabla^2 \vec{u} + (\zeta + \eta/3) \nabla (\nabla \cdot \vec{u}) \quad (4.21)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (4.22)$$

Da hier die Dichte ρ eine abhängige Variable ist, fehlt somit noch eine Gleichung zur Bestimmtheit des Systems. Aus der Energieerhaltung kann man diese unter geeigneten thermodynamischen Annahmen ableiten [Köster06A]. Der Druck ist im isentropen Fall mit der Dichte ρ über die Schallgeschwindigkeit v verknüpft:

$$p = v_{Fluid}^2 \rho \quad (4.23)$$

Damit ist für die kompressible Simulation die Anzahl an abhängigen Variablen genauso groß wie im Fall der Simulation einer inkompressiblen Flüssigkeit.

Bei der FEM-Methode wird nun eine komplexe Geometrie i.a. durch tetraedrische Elemente approximiert. In diesen Elementen werden die abhängigen Variablen auf Knotenpunkten durch Basisfunktionen angenähert. Dabei entstehen N_{DOF} Freiheitsgrade, welche die Dimension der Matrix \mathbf{A} bestimmen. Bei Erhöhung der Freiheitsgrade wächst die Größe der Matrix zwar quadratisch, die Anzahl ihrer nicht-verschwindenden Einträge i.a. aber nur linear. Durch geschickte Speicherung vermeidet man Multiplikationen mit Null-Einträgen, weshalb der Aufwand also idealerweise linear mit der Anzahl an Freiheitsgraden N_{DOF} skaliert. Die Anzahl an Freiheitsgraden wird im folgenden Abschnitt abgeleitet.

Die Anzahl an Knotenpunkten N_{Knoten} pro Gitterelement hängt von der Modellierung des Systems ab. Als Basisfunktionen werden i.a. Lagrange-Elemente (polynomiale Funktionen [Comsol05B]) eingesetzt, deren Ordnung die Anzahl an Knotenpunkten beeinflusst, da höhere Ordnungen Zwischenpunkte auf den Kanten der Gitterelemente benötigen. Von COMSOL werden folgende Richtwerte für N_{Knoten} in Abhängigkeit von der Ordnung des Lagrange-Elements für tetraedrische 3d-Gitterelemente angegeben¹:

$$N_{Knoten} = \begin{cases} 0.2 & k = 1, \text{ linear tetraedrisch} \\ 1.4 & k = 2, \text{ quadr. tetraedrisch} \end{cases} \quad (4.24)$$

Kommt eine Größe in der Navier-Stokes-Gleichung mit einer Ableitung der Ordnung k vor, so sollte die Basisfunktion mindestens dieselbe Ordnung besitzen, um in den Integralen der schwachen Formulierung keine Konstanten in den Integranden zu erhalten. Man beschränkt sich deshalb meist auf Elemente der Ordnung $k = 2$ für die Geschwindigkeit \vec{u} und der Ordnung $k = 1$ für den Druck p , um die Anzahl an Knotenpunkten niedrig zu halten.

Die Anzahl an Freiheitsgraden N_{DOF} des gesamten Systems richtet sich nach der Anzahl an abhängigen Variablen $N_{Variablen}$. Genaue Relationen für N_{DOF} können nicht angegeben werden, weil auf den Rändern einzelne Freiheitsgrade verschwinden können. Damit wird das Verhältnis zwischen Oberflächen und Volumen wichtig. Ein oberes Limit erhält man aber mit der Anzahl an Gitterelementen N_{El} :

$$N_{DOF} \leq N_{Knoten} N_{El} N_{Variablen} \quad (4.25)$$

Soweit unterscheidet sich die kompressible Simulation weder in der Anzahl abhängiger Variablen noch in der Ordnung der Basisfunktionen von einer Simulation der inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichung.

Jedoch bedarf die Simulation von akustischen Vorgängen wie in Kapitel 4.1.1 einer hohen Diskretisierungsdichte. In relevanten Bereichen muss eine Wellenlänge demnach durch mindestens fünf Elemente abgedeckt werden, ansonsten sind die Resultate zu unpräzise. Da die $1/e$ -Abklinglänge der Schallintensität im Wasser (siehe Kapitel 4.2.3) i.a. größer als die maximalen Abmessungen des Fluid-Reservoirs ist, ist das gesamte Fluid-Reservoir relevant und muss durch Gitterelemente mit Kantenabmessungen von

¹<http://www.comsol.com/support/knowledgebase/875.php>

etwa einem Fünftel der Wellenlänge approximiert werden. In zwei Dimensionen ist dies ohne weiteres möglich, in drei Dimensionen erhält man jedoch schnell etwa 10^6 Freiheitsgrade, wie folgendes Beispiel zeigt. In [Köster06A] wurde das Acoustic Streaming (SAW-Frequenz 100 MHz) in einem Volumen $250 \times 250 \times 100 \mu\text{m}^3$ berechnet. Dies entspricht etwa $17 \times 17 \times 7 \lambda_{H_2O}^3$ und deckt damit, im Vergleich zur 1/e-Abklinglänge der Schallintensität in Wasser $l_{H_2O} = 148 \lambda_{H_2O}$ (nach Gl. (4.27)), gerade die Einkopplungsregion der SAW ab. Die Rechnung dauerte sechs Tage und beanspruchte fast 8 GB Arbeitsspeicher. In dieser Arbeit besitzen die verwendeten Fluid-Reservoirs viel größere laterale Abmessungen. Solche Systeme besitzen nach Gl. (4.25) weit über 10^8 Freiheitsgrade und sind demnach weder vom Speicher- noch vom Rechenaufwand berechenbar.

Gleichungssysteme mit 10^6 Freiheitsgraden lassen sich mit direkten Lösern wie UMF-PACK oder SPOOLES wegen des Speicheraufwands nicht lösen. Es finden deshalb iterative Löser wie CG oder GMRES Anwendung, mit dem auch in [Köster06A] gearbeitet wurde. Die geometrischen Multigrid Löser bieten für Acoustic Streaming keine Vorteile. Bei diesem Verfahren wird das System zunächst auf gröberen Gittern gelöst und diese Lösung für den Lösungsprozess auf feineren Gittern verwendet, was sich auf Speicherersparnis und Konvergenz positiv auswirkt. Wie aber soeben erläutert, gibt es bei Akustik-Simulationen ein oberes Limit für die Vergrößerung, ab dem die Resultate unphysikalisch werden. Vielversprechender sind Ansätze, welche die Akustik mit Boundary Element-Methoden (BEM) und die Fluidik mit FEM-Methoden zu lösen. BEM-Löser sind in der Akustik sehr beliebt, weil nur die Ränder eines Gebiets diskretisiert werden müssen, was den Speicheraufwand drastisch verringert. Die Behandlung von nichtlinearer Akustik mit BEM-Methoden ist allerdings unklar, weshalb die Verwendung für die Simulation des Acoustic Streaming noch zu analysieren bleibt [Köster06B].

Um den Speicheraufwand zur Simulation der Akustik und den zusätzlichen Rechenaufwand durch die zeitabhängige Lösung mit anschließender Zeitmittelung zu umgehen, soll in dieser Arbeit die Acoustic Streaming-Volumenkraft nicht simuliert, sondern modelliert werden. Im folgenden Abschnitt wird anhand von Experimenten ein Ansatz für die vom Acoustic Streaming erzeugte Volumenkraft \vec{f} abgeleitet. Mit diesem Kraftterm in der stationären Stokes-Gleichung (4.9) kann das Acoustic Streaming dann auch in drei Dimensionen effizient simuliert werden.

4.2 Experimente zur SAW-Fluidik

4.2.1 Geometrische Einflüsse

In Abb. 4.3B ist ersichtlich, dass bei ungestörter Ausbreitung der Schallwellen im Wasser der Rayleigh-Winkel selbst in der Strömung erkennbar ist. Der Grund hierfür ist die große Ausdehnung des verwendeten Fluid-Reservoirs: Eine Schallwelle die an dessen Grenzen reflektiert wird und in den beobachteten Bereich zurückkehrt, ist bereits

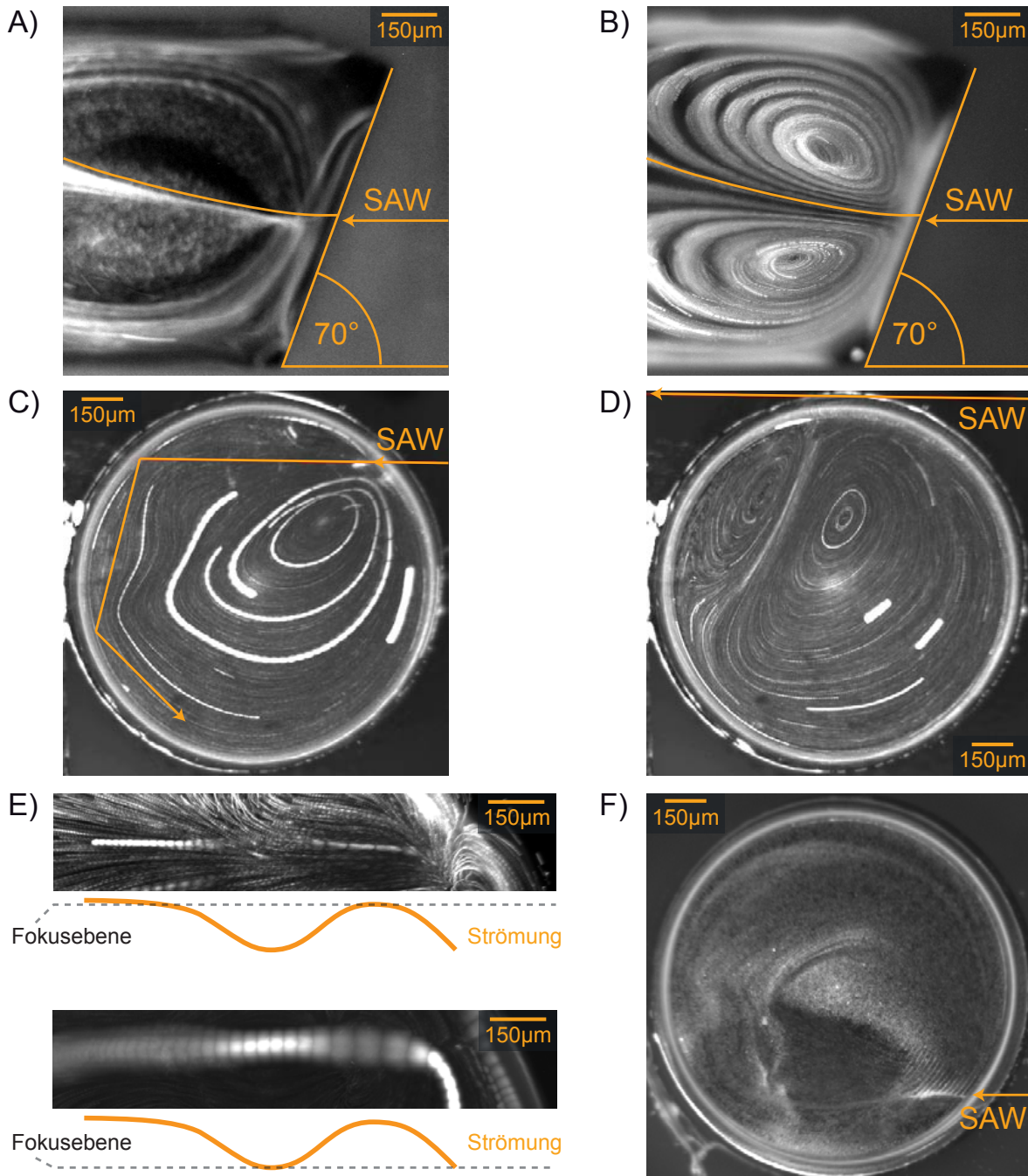


Abbildung 4.2 Ergebnisse nach [Gogel06]: Die Grenzfläche eines freien Tropfens ist um 70° gegen die Ausbreitungsrichtung der SAW verkippt. Wie parallel eingezeichnet ist der Verlauf des Strömungsprofils für (A) Wasser und (B) NaOH nahezu identisch. Fluidik im Katenoid: (C) Die Strömung kann qualitativ anhand der Propagationsrichtung der Schallwellen verstanden werden. (D) Bei streifenden Einfall der SAW bewirken die vom Meniskus (leuchtendes Randgebiet) zur Mitte abgelenkten Schallwellen maßgeblich die Strömung. (E) Die Auf-/Abbewegung eines Beads führt es lokal in die Fokusebene des Mikroskops. Die Fokusebenen der Bilder legen dann die skizzierte Strömung nahe. (F) Am Eintrittspunkt kommt es meist zur Akkumulation von Beads in streifenartigen Mustern.

stark genug gedämpft um keine signifikante Fluidik mehr zu verursachen. Dies ändert sich, wenn an Orten großer Schallamplitude im Wasser (z.B. im Einkopplungsbereich) Reflexionen auftreten. Dieser Einfluss wurde unter anderem in der Bachelorarbeit von Daniel Gogel [Gogel06] untersucht. Eine Zusammenfassung der Ergebnisse erfolgt in diesem Abschnitt.

Mit einem TIDT wird ein schmaler Schallpfad an einer bestimmten Position des Fluid-Reservoirs erzeugt. Die Schallpfadbite (Halbwertsbreite) beträgt $\approx 144 \mu\text{m}$ für Abb. 4.2A-B und $\approx 119 \mu\text{m}$ für Abb. 4.2C-F. Die Positionsbestimmung der SAW geschieht nach Gl. (2.21). Zunächst konnte an einem Tropfen mit einer Grenzfläche, die gegen die SAW-Ausbreitungsrichtung verkippt ist, der Einfluss der Akustik untersucht werden. Durch die verkippte Grenzfläche wird die Strömung ebenfalls abgelenkt (vgl. Abb. 4.2A), wobei eine Variation der Schallgeschwindigkeit der Flüssigkeit zu einer Änderung der Ablenkung führen sollte, falls die Ablenkung akustisch bedingt ist. Es konnte gezeigt werden, dass eine Erhöhung der Schallgeschwindigkeit des Wassers durch Zugabe von NaOH (0.3-molare Lösung: Schallgeschwindigkeit 2299 m/s [Gogel06]) keine signifikante Änderung im Verlauf des Strömungsprofils verursacht (vgl. Abb. 4.2A und B), obwohl sich dabei die Schallwellenlänge im Wasser verringert. Stattdessen haben die Grenzflächen eines Wasservolumens erheblichen Einfluss auf die Fluidik. Dies wurde experimentell anhand eines Katenoid-förmigen Fluid-Reservoirs ermittelt. Ein Katenoid kann als Zylinder mit einem konkaven Mantel verstanden werden, der dem Meniskus zwischen Deckel und Boden des Fluid-Reservoirs entspricht. Über eine Weglänge von etwa 1 mm konnte die Strömung qualitativ mit dem Propagationsweg der Schallwellen im Wasser identifiziert werden (vgl. Abb. 4.2C). Außerdem wurde eine deutliche Ablenkung der Strömung durch den Meniskus des Katenoids registriert, wenn dessen Ausdehnungen größer als die 1/e-Abklinglänge der SAW-Intensität wurden (vgl. Abb. 4.2D). Auch zwischen Boden und Deckel des Katenoids konnte die auf- und abstrebende Strömung anhand von Beads verfolgt werden. Dazu wurde die Fokusebene auf Boden und Decke des Katenoids justiert und die Stellen betrachtet, an denen Beads im Fokus erkennbar werden. Abb. 4.2E legt dann die skizzierte Strömung nahe.

Darüber hinaus wurden vor allem im Einkopplungsbereich der SAW stationäre Bead-Rippen am Boden beobachtet (vgl. Abb. 4.2F), deren Ursprung vermutlich auf interferierende Schallwellen im Wasser zurückzuführen ist.

Diese Erkenntnisse lassen die Folgerung zu, dass zur Erklärung der globalen Fluidik außerhalb des Einkopplungsbereichs der SAW die Welleneigenschaften der Schallwellen im Wasser nicht relevant sind. Hierfür ist es demnach ausreichend, die Propagation der Schallwellen zu betrachten. Im Einkopplungsbereich, wo offensichtlich die Welleneigenschaften wichtig werden, kann die Propagation allein nicht alle Effekte erklären.

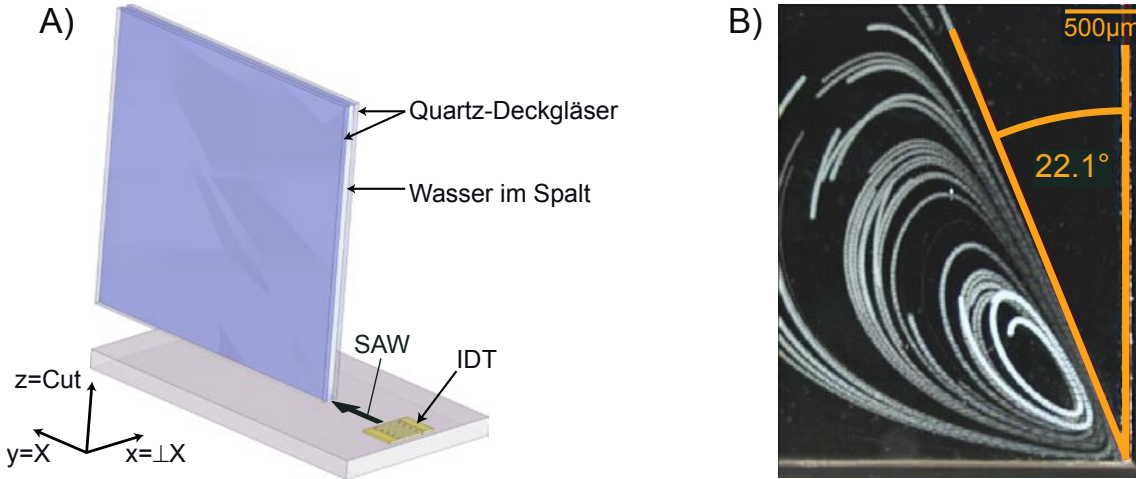


Abbildung 4.3 (A) Auf einem LiNbO_3 128° rot Y-Cut Substrat ist ein IDT aufgebracht, der auf ein Fluid-Reservoir zwischen zwei Quarz-Deckgläsern zeigt. Mit einem Umlenkspiegel wird das Fluid-Reservoir unter einer Stereolupe seitlich betrachtet. (B) Das Strömungsprofil erlaubt die Messung des Rayleigh-Winkel θ_R nach Gl. (4.1).

4.2.2 Zusammenhang zwischen Fluid-Geschwindigkeit und SAW-Leistung

Die Theorien zum Acoustic Streaming [Eckart48, Nyborg65, Köster06A] besagen, dass die Fluid-Geschwindigkeit proportional zum Quadrat der Schallamplitude im Wasser (entspricht der Schallintensität) ist. In diesem Abschnitt wird geprüft, inwiefern diese Annahmen für die üblichen Fluid-Geschwindigkeiten unterhalb von $5 \cdot 10^{-3} \text{ m/s}$ zutreffen.

Um dies experimentell zu verifizieren, wurde der in Abb. 4.3A skizzierte Aufbau konzipiert. Ein IDT auf LiNbO_3 128° rot Y-Cut erzeugt eine SAW, die unterhalb des Wassers einkoppelt, das im Spalt zwischen zwei Quarz-Deckgläsern eingeschlossen ist. Die Ausdehnungen des Reservoirs sind dabei mehrere Millimeter, sodass die im Wasser generierten Schallwellen bereits stark gedämpft sind, wenn sie durch Reflexionen in den betrachteten Einkopplungsbereich zurückkehren. Das Reservoir wird über einen Umlenkspiegel durch eine Stereolupe mit der JVC TK-C1381 Kamera aufgenommen. In Abb. 4.3B erlaubt das Strömungsprofil die Messung des Rayleigh-Winkels, der sich nach Gl. (4.1) zu $\theta_R = 21.8^\circ$ ergibt.

Für quantitative Messungen der Fluid-Geschwindigkeit werden ($r_P = 10 \mu\text{m}$)-Beads verwendet, was bei der verwendeten Vergrößerung vier Pixeln der Kamera entspricht. Damit lassen sich Particle-Tracking Algorithmen nach Kapitel 3.1.7 anwenden und gleichzeitig ein großer Bildausschnitt untersuchen. Somit können für eine Reihe angelegter Leistungen die Geschwindigkeitswerte von Beads entlang ihrer Trajektorien ermittelt werden. In Bereichen geringer Geschwindigkeit stoßen die Tracking-Algorithmen an ihre Grenzen und produzieren verrauschte Werte, die in Mathematica 4.0 nachträglich geglättet werden. Das zuständige Programm ermittelt alle Messpunkte zum aktuellen Zeitpunkt in einem Umkreis von drei Bead-Durchmessern und mittelt diese.

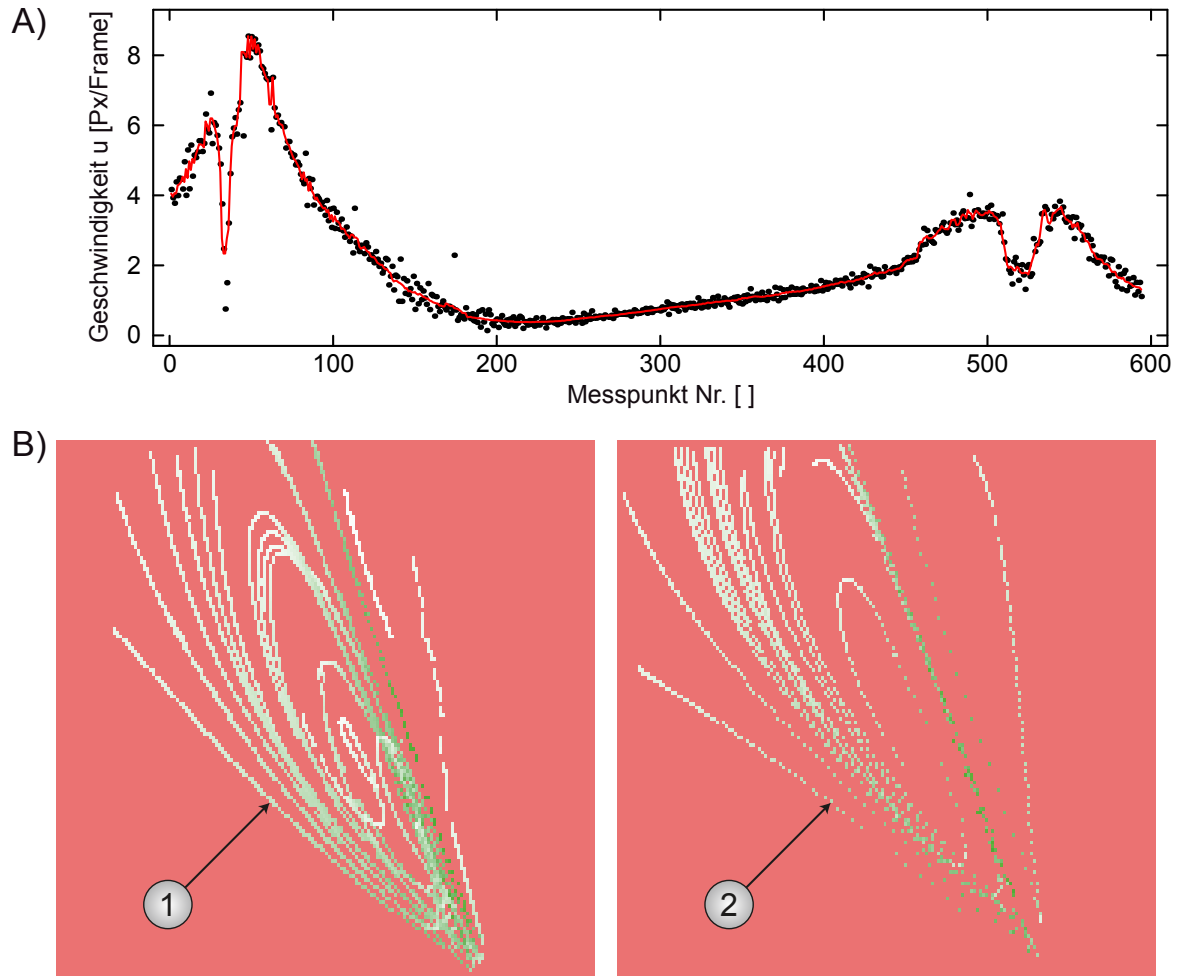


Abbildung 4.4 (A) Der Glättungsalgorithmus mittelt entlang einer Trajektorie in Bereichen niedriger Fluid-Geschwindigkeit, ausgeprägte Geschwindigkeitsänderungen bleiben unberührt. **(B)** Die Geschwindigkeitsfelder zweier unterschiedlicher Leistungen sind zum Vergleich in Boxen der Kantenlänge sechs Pixel unterteilt. Rote Bereiche enthalten keine Messwerte, die restlichen Boxen sind nach relativer Fluid-Geschwindigkeit eingefärbt. Für die Box (1) ist im zu vergleichenden Geschwindigkeitsfeld anderer Leistung bei (2) ebenfalls eine Box mit Geschwindigkeitsdaten vorhanden.

In Bereichen niedriger Fluid-Geschwindigkeit werden so mehrere Messpunkte einbezogen und gemittelt, bei hoher Fluid-Geschwindigkeit befindet sich in der Umgebung nur der aktuelle Messpunkt. Deshalb bleiben die ausgeprägten Geschwindigkeitsänderungen unverändert, wie in Abb. 4.4A anhand einer typischen Trajektorie illustriert ist.

Für verschiedene Leistungen lassen sich so die Fluid-Geschwindigkeitsfelder bestimmen, die dann punktweise verglichen werden. Da die Größe eines Beads mit vier Pixeln eine untere Grenze der Auflösung vorgibt, wird jedes Geschwindigkeitsfeld in Boxen von sechs Pixel Kantenlänge unterteilt, die dann zum Vergleich herangezogen werden. Innerhalb dieser Boxen anfallende Werte werden arithmetisch gemittelt. Ein Vergleich der Geschwindigkeitsfelder zweier Leistungen ist anhand jeder Box möglich, für die in beiden Feldern Geschwindigkeitsdaten vorliegen. Größere Boxen erlauben i.a. mehr Vergleichspunkte zwischen Geschwindigkeitsfeldern zweier Leistungen, verfälschen aber

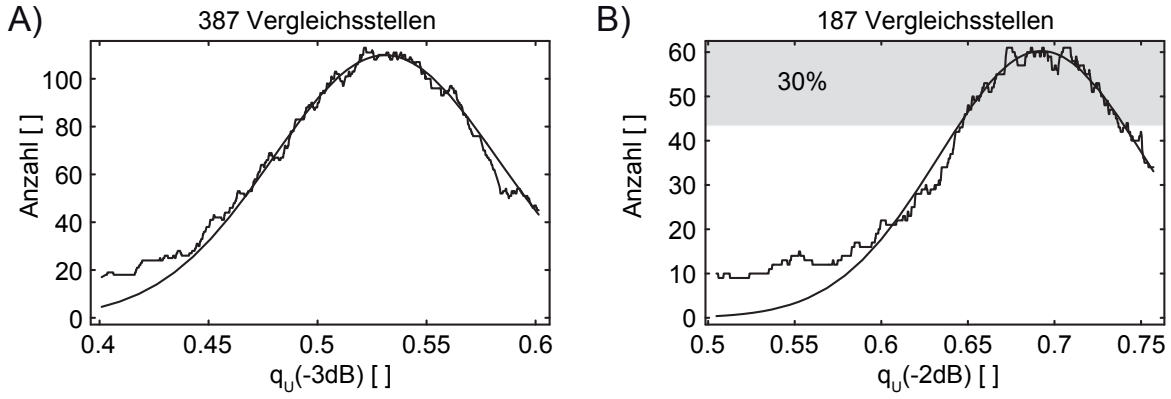


Abbildung 4.5 (A) Histogramm der gebildeten Quotienten q_u im Vergleich eines Geschwindigkeitsfelds, dass durch den Betrieb mit 3 dB geringerer Leistung als das Referenz-Geschwindigkeitsfeld erhalten wurde: Die Verteilung um den zentralen Wert lässt sich durch einen Gauß-Fit annähern. (B) Im Fit werden nur Daten berücksichtigt, die bis zu 30% unterhalb des Maximalwerts verwendet, um den Histogrammverlauf in der Nähe des zentralen Werts und nicht die fehlerbehafteten Flanken zu approximieren.

auch die lokale Geschwindigkeitsinformation, weshalb hier eine bewusst niedrige Boxgröße gewählt wird. In Abb. 4.4B sind zwei solche Beispielfelder dargestellt. Rote Bereiche enthalten keine Messdaten, der Rest ist für das jeweilige Feld zwischen weiß und grün skaliert. Eine mögliche Vergleichsbox ist bei (1) und (2) markiert.

Bildet man nun für alle möglichen Vergleichsboxen zweier Geschwindigkeitsfelder die Quotienten der Fluid-Geschwindigkeiten q_u , so streuen diese um einen zentralen Wert. Der Grund hierfür ist das Geschwindigkeitsprofil, dass sich zwischen den Deckgläsern in x -Richtung ausbildet. Ist dieses näherungsweise quadratisch, so müsste in der Box-Mittelung die mittlere Geschwindigkeit z.B. $\bar{u} = 2/3 u_{max}$ der lokalen Maximalgeschwindigkeit betragen. Dieser Grenzwert wird nur erreicht, wenn sehr viele Teilchen eine Box durchqueren. Für manuelle Messungen ist dies zeitlich aber kaum realisierbar, weshalb die Abweichungen zu einer Streuung von q_u führen.

Darum betrachten wir das Histogramm, das durch eine gleitende Histogrammfunktion aus den ermittelten Quotienten q_u entsteht. Anhand zweier Beispiele ist in Abb. 4.5A und B dargestellt, dass sich der zentrale Wert durch einen Gauß-Fit ermitteln lässt. Hierbei werden nur die Werte bis 30% unterhalb des Maximums berücksichtigt, um nicht die fehlerbehafteten Flanken zu approximieren (siehe Abb. 4.5B). Somit lässt sich, bezogen auf das Geschwindigkeitsfeld einer Referenzleistung, die relative Geschwindigkeitsänderung q_{fit} aus der Position des Gauß-Fits errechnen. In Abb. 4.5A erwartet man wegen der um 3 dB geringeren Leistung etwa die halbe relative Geschwindigkeit, was durch $q_{fit} = 0.53$ bestätigt wird.

Im Experiment wird relativ zur Referenzleistung ($P_{rel} = 0 \text{ dB}$) zwischen $P_{rel} = -3 \text{ dB}$ und $P_{rel} = +4 \text{ dB}$ in Abständen von 1 dB das Geschwindigkeitsfeld ermittelt. Nach der oben beschriebenen Methode wird $q_{fit}(P_{rel})$ aus den Gauß-Fits errechnet (siehe im Anhang Abb. A.10 für die entsprechenden Fits) und gegen P_{rel} in Abb. 4.6 aufgetragen. Die Fehlerbalken in Ordinatenrichtung zeigen die Halbwertsbreite der Gauß-Fits,

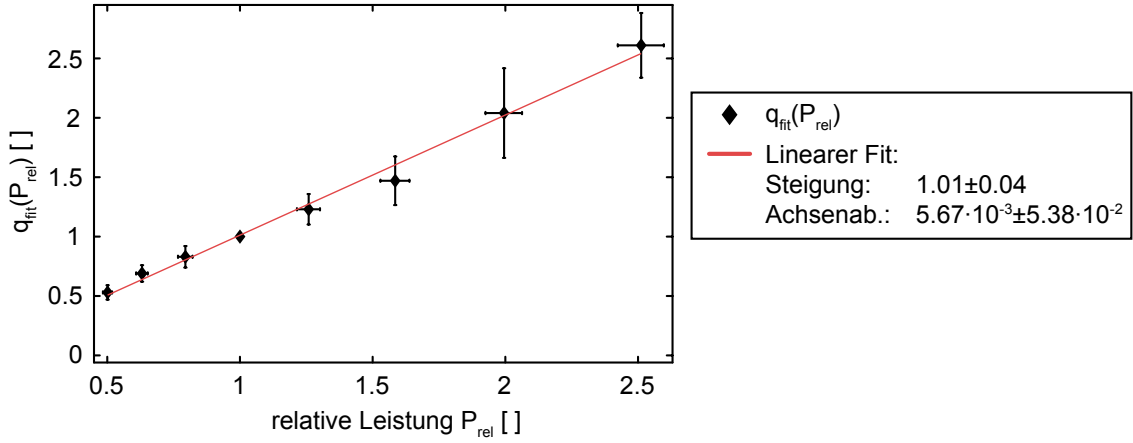


Abbildung 4.6 Aus der Auftragung von q_{fit} gegen P_{rel} erkennt man den linearen Zusammenhang mit Steigung 1. Der Fehler im Achsenabschnitt kann durch die Gravitation erklärt werden.

diejenigen in Abszissenrichtung ergeben sich durch die Ungenauigkeit des verwendeten Verstärkers. Die Unsicherheit im Achsenabschnitt rührt von der Gravitation her. Eine Messung des Fall-Geschwindigkeitsfelds der Beads bei ausgeschalteter SAW ergibt nach dem Durchlauf der obigen Prozedur gerade $q_{fit} = 5.68 \cdot 10^{-2}$, also etwa den Fehler des Achsenabschnitts. Die Proportionalität zwischen der Fluid-Geschwindigkeit und der SAW-Leistung wird durch den linearen Verlauf bestätigt. Das „Transmission-Line“ Modell nach [Datta86] zeigt in Gl. (2.36) und (2.37), dass die SAW-Amplitude proportional zur Wurzel der SAW-Leistung ist. Insgesamt kann also ein linearer Zusammenhang zwischen der Fluid-Geschwindigkeit und der SAW-Intensität nachgewiesen werden.

Für die Modellierung der Acoustic Streaming-Kraft sind diese Erkenntnisse essentiell. Die stationäre Stokes-Gleichung (4.9) in der Mikrofluidik zeigt, dass die Fluid-Geschwindigkeit proportional zur Acoustic Streaming-Kraft \vec{f} ist. In diesem Abschnitt wurde verifiziert, dass die Fluid-Geschwindigkeit proportional zur SAW-Intensität ist. Nach Gl. (4.3) ist an der Grenzfläche Wasser-Substrat die Schallamplitude im Wasser gleich der SAW-Amplitude. Somit folgt, dass die Acoustic Streaming-Kraft proportional zur lokalen Schallintensität im Wasser ist. Deshalb muss für die Kraft \vec{f} das Abklingverhalten der Schallintensität im Wasser angesetzt werden. Wenn also κ_{H_2O} und κ_{op} die 1/e-Abklinglängen der Schallamplitude im Wasser und der SAW-Amplitude sind, dann sind für die Modellierung von \vec{f} die 1/e-Abklinglängen der Intensitäten $l_{H_2O} = \kappa_{H_2O}/2$ und $l_{op} = \kappa_{op}/2$ zu verwenden. Die beiden Größen l_{op} und l_{H_2O} sind experimentell zugänglich. Für l_{op} ist bereits in Gl. (2.32) und (2.33) eine Abschätzung erfolgt, die in Kapitel 4.2.4 durch eine Messung präzisiert wird. Für l_{H_2O} werden experimentelle Ergebnisse der Literatur im nächsten Abschnitt vorgestellt. Außerdem lässt sich vermuten, dass \vec{f} im wesentlichen parallel zum Ausbreitungsvektor der Wasserwelle ist, weil der Anstellwinkel der Strömung mit dem Rayleigh-Winkel θ_R zusammenfällt.

4.2.3 1/e-Abklinglänge der Schallintensität im Wasser

Die Dämpfung von Schallwellen in Wasser hängt stark von deren Frequenz ab. Zum Beispiel sind für Frequenzen unterhalb von 500 kHz ionische Relaxationsphänomene der gelösten Salze der dominante Anteil der Dämpfung [Coates89]. Für Frequenzen über 1 MHz ist die viskose Reibung der maßgebliche Dämpfungsmechanismus. Dieser kann für Wasser durch folgenden Ausdruck beschrieben werden:

$$\alpha_{visc} = (2.1 \cdot 10^{-10} (T(^{\circ}\text{C}) - 38^{\circ}\text{C})^2 + 1.3 \cdot 10^{-7} \text{ K}^2) f^2 \frac{\text{dB}}{\text{K}^2 \text{ m kHz}^2} \quad (4.26)$$

Hierbei ist T die Wassertemperatur in Grad Celsius und f die Frequenz der Schallwelle in kHz (entspricht der SAW-Frequenz). Die 1/e-Abklinglänge der Schallintensität lässt sich dann bestimmen zu:

$$l_{H_2O} = \frac{10 \text{ dB}}{\ln(10) \alpha_{visc}} \quad (4.27)$$

Für $T = 20^{\circ}\text{C}$ bei $f = 150 \text{ MHz}$ ergibt sich so:

$$l_{H_2O} = 975 \mu\text{m} = 98.8 \lambda_{H_2O} \quad (4.28)$$

Eine punktuelle Auswertung der Messungen nach [Hagen04] in Tab. B.4 ergibt Abklinglängen, die etwa 7% geringer sind. Als theoretischer Vergleich kann der klassische, viskose Absorptionsparameter der Energie ausgewertet werden [Edmonds81]:

$$\alpha_{H_2OKl} = 2 \frac{8\pi^2 \eta_{H_2O} f^2}{3\rho v_{H_2O}^3} = 3.6 \cdot 10^2 \text{ m}^{-1} \quad (4.29)$$

$$l_{H_2OKl} = \alpha_{H_2OKl}^{-1} = 2.8 \text{ mm} = 2.84 \cdot 10^2 \lambda_{H_2O} \quad (4.30)$$

Abweichungen bis zu einem Faktor 3 sind dabei im HF-Bereich laut Edmonds durchaus im Rahmen, da die Viskosität frequenzabhängig ist.

4.2.4 1/e-Abklinglänge der SAW-Intensität

In Kapitel 2.9 wurden bereits erste Schätzungen für den Energieverlust der SAW durch Abstrahlung ebener Wellenfronten in das Wasser getätigt. In diesem Abschnitt werden diese Schätzungen durch Messungen präzisiert.

Die Messung erfolgt nach dem Prinzip in Abb. 4.7A (nach [Hörner05]) unter Verwendung einer Verzögerungsleitung nach Kapitel 2.8. Mit einem HF-Generator Rhode & Schwarz SMP 02 wird ein gepulstes HF-Signal der Breite 300 ns erzeugt, das an IDTA einen SAW-Wellenzug mit ca. 1 mm Länge anregt. Dieser wird an IDTB wieder in ein elektrisches Signal konvertiert, wobei die Transmission vom Oberflächenbelag der Verzögerungsleitung abhängt. Das Signal wird verstärkt und vom Spectrum Analyzer Agilent E4402B gleichgerichtet. Dieses gleichgerichtete Signal wird am Video Out abgegriffen und an einem Oszilloskop (LeCroy 9362) mit hoher Tastrate (10 Gs/s) und 1000-facher Mittelung angezeigt. Die durch die SAW im Substrat übertragene Energie wird IDTB zuerst erreichen. Schallwellen die in das Wasser abgestrahlt werden,

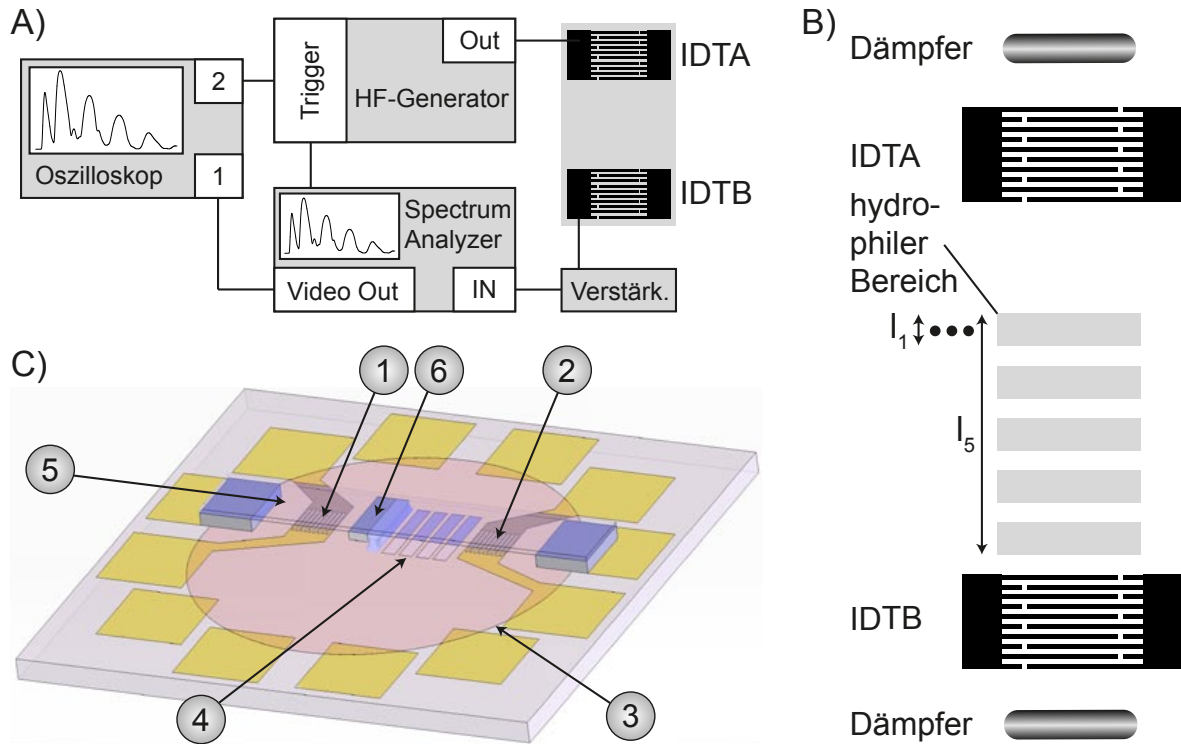


Abbildung 4.7 (A) Messprinzip: Das Signal eines Generators erzeugt an IDTA eine SAW, die durch den Wasserbelag auf der Verzögerungsleitung gedämpft wird. Die transmittierte SAW wird an IDTB in ein elektrisches Signal konvertiert, das am Spectrum Analyzer gleichgerichtet und auf dem Oszilloskop ausgegeben wird. Durch die Zeitauflösung des transmittierten Leistungssignals am Oszilloskop kann spezifisch die SAW-Dämpfung in Abhängigkeit von der Länge des Wasserbelags ermittelt werden.

(B) Die Dämpfung durch die Verzögerungsleitung hängt von der Länge des Fluid-Reservoirs ab, die über die hydrophilen Streifen hinweg zwischen l_1 und l_5 variiert werden kann. Die IDTs generieren bidirektional Wellen, die um die Verzögerungsleitung herum durch Dämpfer ausgelöscht werden. Somit ergeben sich keine störenden Anteile im Messsignal aufgrund reflektierter SAWs. **(C)** 3d-Ansicht des Chips: IDTA (1) und IDTB (2) werden durch eine SiO-Schicht (3) geschützt. Die hydrophilen Streifen (4) bilden mit einem Quartz-Glasdeckel (5) das Fluid-Reservoir. Ein Streifen ist bereits befüllt dargestellt, wobei das Wasser am Klebestreifen (6) haftet (Probenfoto im Anhang Abb. B.5A).

legen einen längeren Weg in einem Medium mit geringerer Schallgeschwindigkeit zurück und erreichen IDTB damit später. Im zeitlichen Verlauf kann damit spezifisch die SAW-Dämpfung bestimmt werden, ohne den störenden Anteil der Schallwellen die im Fluid-Reservoir propagieren.

Auf der Verzögerungsleitung in Abb. 4.7B wird die Länge des Wasserbelags zwischen l_1 und l_5 variiert und die zugehörige Transmission vermessen. Die hydrophilen Zonen dienen als Ankerflächen, sodass beim Auffüllen stets bis einschließlich zur nächsten Zone befüllt wird. Die Rückseiten der IDTs sind jeweils mit Dämpfern aus Klebeband versehen, damit nach hinten abgestrahlte Wellen stark gedämpft werden, bevor sie durch Reflexion an der Chipkante wieder in den Sensorbereich der Verzögerungsleitung zurückkehren. In der 3d-Ansicht des entsprechenden Chips (Abb. 4.7C) erkennt man neben den Elementen IDTA (1), IDTB (2) und der SiO-Schutzschicht (3) die Zonen zur Befüllung mit Wasser (4), die nach oben durch einen Quartz-Glasdeckel (5) begrenzt

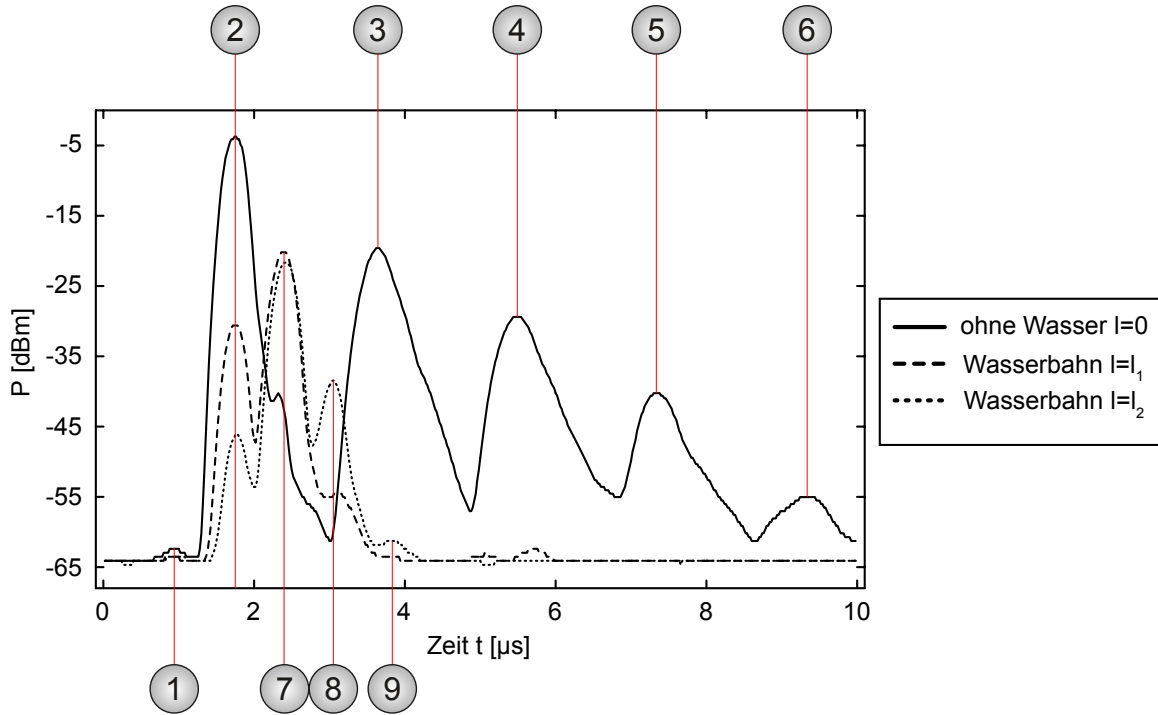


Abbildung 4.8 Typische Transmissionssignale für verschiedene Längen l des Fluid-Reservoirs, wie sie am Oszilloskop für die Messung auf LiNbO₃ 128° rot Y-Cut in X-Richtung empfangen werden. Die empfangene Leistung P in dBm ist gegen die Zeit t in μs aufgetragen (Erklärung der Nummern im Text).

sind. Die erste Zone ist bereits befüllt, wobei ein Klebestreifen (6) verhindert, dass sich ein stark gekrümmter Meniskus ausbildet. Dadurch entsteht am Eintritt der SAW eine praktisch vertikale Wassergrenzfläche (Abb. 4.9A) und angeregte Schallwellen im Wasser propagieren bis zum Glasdeckel und reflektieren erst dort (Abb. 4.9B). Würden die Schallwellen bereits am Meniskus reflektieren und dann wieder ins Substrat eingekoppeln, so könnte man die SAW-Dämpfung nicht mehr zeitlich von Effekten trennen, die bei Schallwellen im Wasser auftreten.

In Abb. 4.8 sind Signale dargestellt, wie sie am Oszilloskop für unterschiedliche Längen l des Fluid-Reservoirs empfangen werden. Der Spectrum Analyzer verschiebt bei der Gleichrichtung das Signal um ca. $800 \pm 40 \text{ ns}$ sodass das Übersprechen von IDTA auf IDTB bei (1) schwach erkennbar ist. Dies ist auch der Zeitpunkt, an dem die Welle von IDTA aus startet. Bei (2) erreicht der Wellenzug gerade IDTB und wird dort ausgelesen. Die benötigte Durchgangszeit t_{transit} lässt sich im Rahmen der Ungenauigkeit konsistent aus der Zeitdifferenz (1)-(2) $t_2 - t_1$ des Experiments oder aus dem IDT-Abstand d_{IDT} und der Schallgeschwindigkeit $v_{\text{SAW}} = v_f$ nach Tab. 2.1 berechnen:

$$t_{\text{transit}}^{\text{Exp}} = t_2 - t_1 = 1.75 \mu\text{s} - 0.8 \mu\text{s} = 0.95 \pm 0.05 \mu\text{s} \quad (4.31)$$

$$t_{\text{transit}}^{\text{Calc}} = \frac{d_{\text{IDT}}}{v_{\text{SAW}}} = \frac{3.97 \text{ mm}}{3989 \text{ m/s}} = 0.99 \pm 0.01 \mu\text{s} \quad (4.32)$$

An IDTB wird aber nicht das gesamte Signal ausgelesen, sondern ein Teil reflektiert. Dieser propagiert zurück zu IDTA, reflektiert dort erneut und kehrt wieder

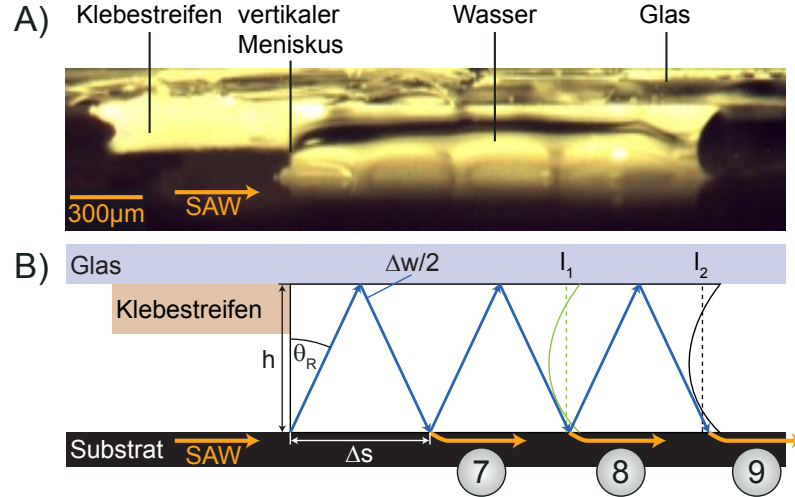


Abbildung 4.9 (A) Seitenansicht des Fluid-Reservoirs: Der Klebestreifen (Abb. 4.7C (6)) erzeugt am Eintrittspunkt der SAW einen nahezu vertikalen Meniskus. (B) In diesem System lässt sich die Wellenausbreitung leicht geometrisch erklären: Schallwellen im Wasser reflektieren am Deckel und koppeln dann teilweise ins Substrat ein. Je nach Anzahl der Reflexionen am Deckel ergeben sich die zeitlich verschobenen Spitzen (7), (8) und (9) in Abb. 4.8. Bei einer Länge l_1 des Fluid-Reservoirs verdeutlicht der eingezeichnete Meniskus, dass maximal zwei Reflexionen am Deckel möglich sind. Analog sind für l_2 drei Reflexionen erlaubt.

zu IDTB zurück. Dieser Anteil durchmisst die Sensorfläche dreimal, weshalb er als *triple transit* bezeichnet wird ([Matthews77] S302). Im Signal ist er bei (3) etwa $t_{3-transit}^{Exp} = 2.84 \mu s = 2.99 t_{transit}^{Exp}$ nach dem Übersprechen sichtbar. Analog erkennt man bei (4) den fünfmaligen Durchgang ($t_{5-transit}^{Exp} = 4.69 \mu s = 4.94 t_{transit}^{Exp}$), bei (5) den siebenmaligen Durchgang ($t_{7-transit}^{Exp} = 6.54 \mu s = 6.88 t_{transit}^{Exp}$) und bei (6) den neunmaligen Durchgang ($t_{9-transit}^{Exp} = 8.54 \mu s = 8.99 t_{transit}^{Exp}$). Diese Signale (3)-(6) verschwinden schnell, wenn die Oberfläche mit Wasser beladen wird, da die Dämpfung i.a. durch den mehrmaligen Durchgang unter dem Wasserbelag schon bei der kleinsten Länge des Fluid-Reservoirs l_1 den Messbereich des Spectrum Analyzers übersteigt. Es lässt sich aber offensichtlich an Position (2) die Dämpfung der SAW bei entsprechender Bahnlänge l_i einfach ablesen. An der Position (7) zeigt sich bei der Befüllung bis l_1 eine zusätzliche Spitze. Diese lässt sich durch Schallwellen erklären, die von der SAW im Wasser unter dem Rayleigh-Winkel angeregt werden (vgl. Kapitel 4.1.1 und Abb. 4.9B), dann am Glasdeckel (Abstand $h = 520 \pm 10 \mu m$ vom Substrat, gemessen mit Mikroskop) reflektieren und wieder teilweise in das Substrat einkoppeln. Dabei legen sie einen Weg Δw im Wasser bei geringerer Schallgeschwindigkeit als auf dem Substrat zurück und verlieren dadurch die Zeit t_{1-H2O} gegenüber dem auf dem Substrat propagierenden SAW-Anteil (Wegstrecke Δs):

$$\Delta w = 2 \frac{h}{\cos(\theta_R)} \quad (4.33)$$

$$\Delta s = 2h \tan(\theta_R) \quad (4.34)$$

$$t_{1-H2O}^{Calc} = \frac{\Delta w}{v_{H2O}} - \frac{\Delta s}{v_{SAW}} = 652 \pm 13 \text{ ns} \quad (4.35)$$

$$t_{1-H_2O}^{Exp} = t_7 - t_2 = 640 \pm 20 \text{ ns} \quad (4.36)$$

Es ergibt sich eine exzellente Übereinstimmung der zeitlichen Verschiebung im Experiment $t_{1-H_2O}^{Exp}$ und des geschätzten Werts $t_{1-H_2O}^{Calc}$. Befüllt man nun das Reservoir bis l_2 , so tritt eine deutliche zweite Spitze bei (8) auf. Hier wird der am Substrat reflektierte Anteil erneut am Glasdeckel reflektiert und erst dann ins Substrat transmittiert, sodass sich die Weglängen Δw und Δs verdoppeln.

$$t_{2-H_2O}^{Calc} = 2 \left(\frac{\Delta w}{v_{H_2O}} - \frac{\Delta s}{v_{SAW}} \right) = 1.31 \pm 0.04 \mu s \quad (4.37)$$

$$t_{2-H_2O}^{Exp} = t_8 - t_2 = 1.28 \pm 0.02 \mu s \quad (4.38)$$

Die dritte Spitze (9) wird erkennbar, da im Experiment $l_2 = 3.05 \Delta s$ ist und damit drei Reflexionen im Fluid-Reservoir Platz finden. Analoges sieht man für die Bahnlänge $l_1 = 2.08 \Delta s$ bei Spitze (8). Damit lässt sich die 1/e-Abklinglänge der SAW deutlich von den anderen Effekten separieren. Die Wellenpropagation im Wasser lässt sich hervorragend durch einfache geometrische Zusammenhänge erklären.

Quantitative Angaben zu den Spitzen (7)-(9) bedürfen weitergehender Theorie zur Bestimmung der Transmissions- und Reflexionsfaktoren zwischen Wasser, Glas und LiNbO₃ 128° rot Y-Cut. Beispielsweise verändert sich der Betrag der Spitze (7) nicht, wenn das Reservoir von l_1 zu l_2 vergrößert wird. Vermutlich besitzt die Schallwelle, die vom Wasser ins Substrat transmittiert, nur einen longitudinalen Anteil, der bei der weiteren Propagation der Welle unter dem Reservoir kaum Energie an das Wasser abgibt (schwache viskose Anbindung nach Gl. (2.35)). Eine genauere Untersuchung der generierten Wellen mit der Theorie der anisotropen Fresnel-Gleichungen (nach [Auld73B] S38) ist im Rahmen dieser Arbeit nicht möglich.

Nimmt man nun ein exponentielles Abklingen der SAW-Intensität nach [Dransfeld70] an, so kann man aus der halblogarithmischen Auftragung der Leistungswerte (2) aus Abb. 4.8 (normiert mit der Maximalleistung ohne Wasser) gegen die zugehörigen Länge des Fluid-Reservoirs die 1/e-Abklinglänge mit linearer Regression bestimmen. Die Signaldaten liegen zunächst als Spannungssignal des Oszilloskops vor. Die Leistungseinheit dBm erhält man wieder, indem die nichtlineare Kennlinie zwischen der Anzeige des Spectrum Analyzers in dBm und dem Signal des Oszilloskops in V nichtlinear mit kubischen Polynomen angenähert wird (siehe Abb. 4.10A). Die Länge des Wasserreservoirs wird anhand des Chip-Bildes im Auflichtmikroskop Abb. 4.10B vermessen, wobei die Meniskusbreite als Unsicherheit angesetzt wird. Als Unsicherheit der Leistung in einem Punkt wird die lokale Standardabweichung des Fits von der Kennlinie in Abb. 4.10A eingesetzt. Anhand dieses Protokolls wurde für die Propagationsrichtung $\perp X$ auf LiNbO₃ 128° rot Y-Cut die Kurve von Abb. 4.10C abgeleitet. Analog konnte in Richtung X die Kurve in Abb. 4.10D gemessen werden (hier sind die Fehlerbalken in Ordinate gerichtet, da sie vernachlässigbar klein sind). Mit den entsprechenden Ausbreitungsgeschwindigkeiten nach Tab. 2.1 kann man damit die 1/e-Abklinglängen

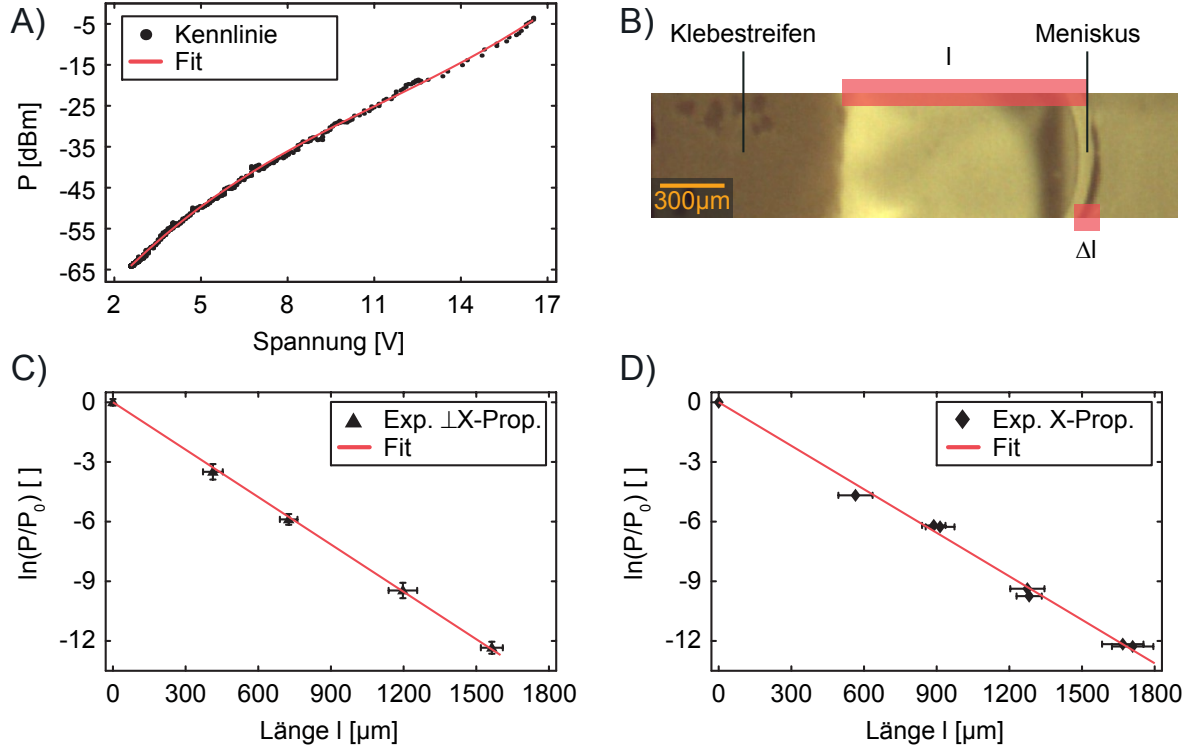


Abbildung 4.10 (A) Die nichtlineare Kennlinie beschreibt den Zusammenhang zwischen der Leistungsanzeige in dBm am Spectrum Analyzer und der Spannungsanzeige am Oszilloskop. (B) Die Länge des Fluid-Reservoirs l wird anhand des Bildes der Stereolupe vermessen. Die Meniskusbreite stellt dabei die signifikante Unsicherheit Δl dar. (C) Halblogarithmische Auftragung der normierten Leistungen gegen die Länge des Fluid-Reservoirs l zur Bestimmung der $1/e$ -Abklinglänge der SAW in $\perp X$ -Richtung mit linearer Regression. (D) Die analoge Messung wurde auch für die SAW in X-Richtung vollzogen.

für beide Richtungen bestimmen:

$$l_{op\perp X}^{Exp} = 126 \pm 1 \mu\text{m} = 5.22 \pm 0.04 \lambda_{SAW\perp X} = 0.45 l_{op\perp X}^{Calc} \quad (4.39)$$

$$l_{opX}^{Exp} = 137 \pm 1 \mu\text{m} = 5.62 \pm 0.09 \lambda_{SAWX} = 0.45 l_{opX}^{Calc} \quad (4.40)$$

In beiden Fällen ergibt sich also eine Abweichung um einen Faktor 0.45 von den Schätzwerten (2.32) und (2.33) aus Kapitel 2.9. Mit diesem Korrekturfaktor kann nun der Ausdruck (2.30) nach [Dransfeld70] angepasst werden, um im beobachteten Frequenzbereich zwischen 130 MHz und 165 MHz eine bessere Schätzung für die $1/e$ -Abklinglänge der SAW-Intensität zu erhalten:

$$l_{op} = 0.45 \frac{\rho_{SAW} v_{SAW}}{\rho_F v_F} \lambda_{SAW} \quad (4.41)$$

Auf Basis dieser Versuchsreihen lässt sich außerdem erhärten, dass die Annahme von Totalreflexion bei den vorkommenden Grenzflächen eine gerechtfertigte Approximation ist (siehe Anhang A.5). Darüber hinaus konnten die beobachteten Phänomene (wie bereits in Kapitel 4.2.1) allein durch geometrische Interpretation der Schallwellen mit Strahlenverläufen in Abb. 4.9B erklärt werden.

4.3 Raytracing-Ansatz

Bevor im Abschnitt 4.4 die einzelnen Elemente zur 3d-Simulation der SAW-Fluidik erläutert werden, soll hier nochmals eine Zusammenfassung des Ansatzes erfolgen, der den späteren Ausführungen zugrunde liegt.

Da der Aufwand der Simulation der effektiven Kraft des Acoustic Streaming in drei Dimensionen nicht zu bewältigen ist (Kapitel 4.1.5), wird diese durch eine Volumen- \vec{f} modelliert. Diese Volumenkraft wird dann in die stationäre Stokes-Gleichung (4.9) eingesetzt, die generell zur Lösung hydrodynamischer Probleme der Mikrofluidik mit kleinen Reynolds-Zahlen herangezogen wird (Kapitel 4.1.3). In Experimenten wurde erörtert, dass für die globale Strömung die Reflexionen an den Grenzflächen des Flüssigkeitsvolumens maßgeblich sind (Kapitel 4.2.1). Deshalb verzichtet man bei der Modellierung von \vec{f} auf die Phaseninformation der Welle. Die ebenen Wellenfronten werden von der SAW unter dem Rayleigh-Winkel in das Wasser abgestrahlt (Kapitel 4.1.1), wo sie dann an Grenzflächen reflektieren können. Die Gesetzmäßigkeiten unterscheiden sich hierbei nicht vom optischen Reflexionsgesetz $\beta = \beta'$ in Abb. 4.11A. Deshalb wird zunächst die Wellenfront wie in Abb. 4.11B dargestellt in Segmente zerlegt, wobei jedes Segment (n) einen Strahl $\vec{R}^{(n)}$ (englisch: *ray*) in Richtung des Wellenvektors trägt. Für die Verfolgung des Propagationswegs (englisch: *to trace*) eines Wellensegments (n) genügt es also den Weg $\vec{r}^{(n)}(j_{ray}^{(n)})$ des jeweiligen Strahls $\vec{R}^{(n)}$ zu beschreiben (englisch: *Raytracing*), der durch die Größe $j_{ray}^{(n)}$ parametrisiert wird. Zuletzt wird die Volumenkraft mit dem Strahl verknüpft: Der normierte Richtungsvektor der Volumenkraft $\vec{f}_{norm}^{(n)}(j_{ray}^{(n)})$ ist entlang des gesamten Weges $\vec{r}(j_{ray}^{(n)})$ gleich dem normierten Richtungsvektor des Strahls $\vec{R}_{norm}^{(n)}(j_{ray}^{(n)})$. Die Stärke der Volumenkraft im Startpunkt $\vec{r}(j_{ray}^{(n)} = 0)$ richtet sich (Kapitel 4.2.2) nach der SAW-Intensität $A^2(j_{saw}^{(n)})$. Diese ergibt sich aus der Amplitude $|A_0|$ am Eintrittspunkt unterhalb des Wassers und der Betrachtung der Wegstrecke $j_{SAW}^{(n)}$, die von der SAW bis zum Startpunkt des Strahls unterhalb der Flüssigkeit zurückgelegt wurde:

$$A(j_{SAW}^{(n)}) = |A_0| \exp\left(-j_{SAW}^{(n)}/\kappa_{op}\right) \quad (4.42)$$

$$\left|\vec{f}^{(n)}(j_{ray}^{(n)} = 0)\right| = |A_0|^2 \exp\left(-j_{SAW}^{(n)}/l_{op}\right) \quad (4.43)$$

Die Berechnung der 1/e-Abklinglänge l_{op} erfolgt nach Gl. (4.41) in Kapitel 4.2.4. Innerhalb des Wassers erfährt die Volumenkraft $\vec{f}^{(n)}(j_{ray}^{(n)})$ dann eine 1/e-Dämpfung auf einer Länge l_{H_2O} nach Gl. (4.27) aufgrund der Anregung des Acoustic Streaming:

$$\left|\vec{f}^{(n)}(j_{ray}^{(n)})\right| = \left|\vec{f}^{(n)}(0)\right| \exp\left(-j_{ray}^{(n)}/l_{H_2O}\right) \quad (4.44)$$

Dadurch ergibt sich die resultierende Kraft in einem Raumpunkt durch Mittelung aller Kräfte dort zusammentreffender Strahlen.

Abschließend bleibt zu bemerken, dass die erwähnten Interferenzeffekte (vgl. Abb. 4.2F) mit diesem Ansatz nicht aufgelöst werden. Zum einen fehlt der Volumenkraft die Phaseninformation und selbst bei deren Berücksichtigung muss dennoch die Diskretisierung

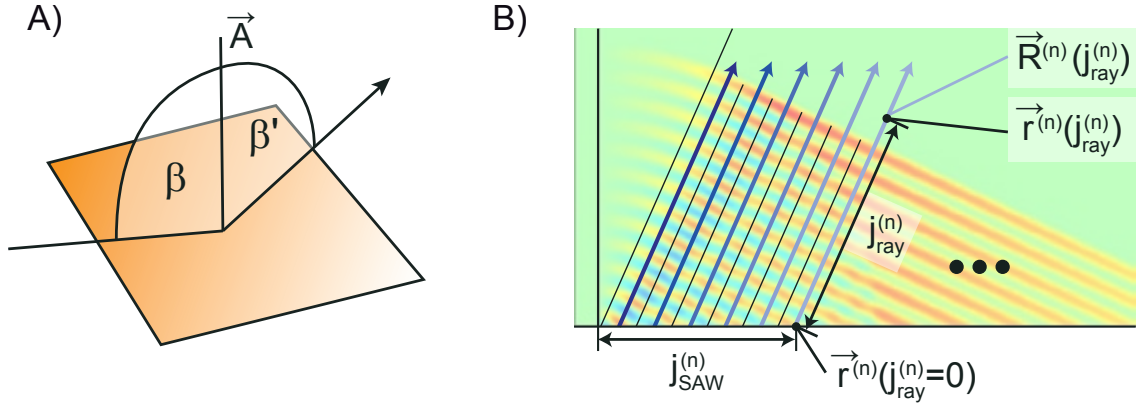


Abbildung 4.11 (A) Die Reflexion von Schallwellen gehorcht dem optischen Reflexionsgesetz. Wenn \vec{A} die Flächennormale bezeichnet, gilt $\beta = \beta'$. **(B)** Senkrecht zur Wellenfront wird diese in Segmente mit jeweils einem Strahl aufgeteilt. Die Stärke des Strahls (n) hängt von seinem Startpunkt ab (angedeutet durch die Farbe des Strahls) und somit von der Wegstrecke $j_{SAW}^{(n)}$, auf der die SAW bis dort gedämpft wurde. Der Propagationsweg im Wasser wird durch $j_{ray}^{(n)}$ parametrisiert.

viel gröber als die Wellenlänge gewählt werden, um den Rechenaufwand gering zu halten. Auf dieser Längenskala verhindert die Mittelung die Behandlung der Interferenzen. Zur Berechnung der Interferenzen in 2d- oder kleinen 3d-Volumina sollte demnach die Simulation der Acoustic Streaming-Volumenkraft nach Kapitel 4.1.5 gewählt werden. Darüber hinaus werden die Grenzflächen Wasser-Glas, Wasser-LiNbO₃ 128° rot Y-Cut und Wasser-Luft als total reflektierend angenommen, wie in Anhang A.5 motiviert wird.

4.4 SAW-Raytracing-Simulation in 3d-Geometrien

Die Simulation der SAW-Fluidik erfordert das Zusammenspiel mehrerer Programme, wie in Abb. 4.12 skizziert ist. Mit dem Surface Evolver wird die Form des Flüssigkeitsvolumens bestimmt und als FEM-Modell für die Simulation der Fluidik in COMSOL Multiphysics exportiert. Außerdem wird ein Raytracing-Modell generiert, in dem mit Mathematica 4.0 ein Bereich ausgewählt wird. Dort berechnet die SAW-Raytracing-Anwendung das Acoustic Streaming-Volumenkraftfeld nach Kapitel 4.3 aus der SAW-Intensität im Schallpfad-Profil. Das so gewonnene Volumenkraftfeld wird in COMSOL Multiphysics zur Lösung der Stokes-Gleichung importiert. Die einzelnen Schritte werden in diesem Kapitel beleuchtet.

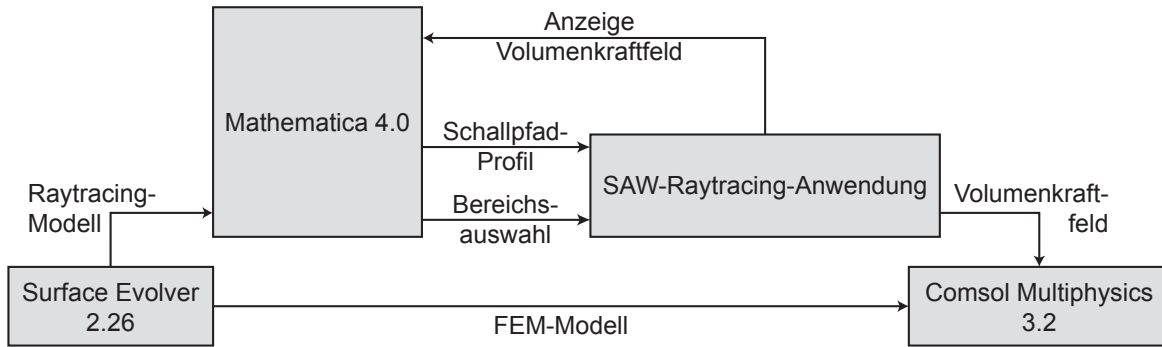


Abbildung 4.12 Bei der Simulation des Acoustic Streaming interagieren mehrere Anwendungen.

4.4.1 Geometriebestimmung mit dem Surface Evolver

Dem Programm Surface Evolver von Ken Brakke (Version 2.26) [Brakke92] kommt in der Raytracing-Simulation der SAW-Fluidik eine zentrale Rolle zu. Da die Grenzflächen für die globale Fluidik ausschlaggebend sind, müssen diese für ein gegebenes System bekannt sein. Nur für wenige Fälle sind Grenzflächen analytisch bekannt, vielmehr definiert man typischerweise im Experiment die benetzte Fläche auf dem Substrat und das Volumen der Flüssigkeit. Der Surface Evolver wird nun dazu verwendet, aus diesen beiden Informationen die natürlich angenommene Form des Volumens abzuleiten. Dieses Volumen wird dann für das Raytracing-Programm (Raytracing-Modell) und den Löser der Stokes-Gleichung COMSOL Multiphysics (FEM-Modell) exportiert.

Der Surface Evolver behandelt Oberflächen als Mengen von Dreiecken. Die Energie des Systems E ist eine Funktion des Vektors aller Dreieckspunkte \vec{X} . Bei einer geringen Variation \vec{Y} der Punkte lässt sich die Energie mit Taylor-Entwicklung bis zur zweiten Ordnung folgendermaßen ausdrücken:

$$E(\vec{X} + \vec{Y}) = E_0 + \vec{G}^T \vec{Y} + 0.5 \vec{Y}^T \mathbf{H} \vec{Y} \quad (4.45)$$

Dabei ist \vec{G} der Energiegradient (T bezeichnet transponierte Größen) und \mathbf{H} die quadratische Hesse-Matrix, welche die zweiten partiellen Ableitungen beinhaltet. Der Surface

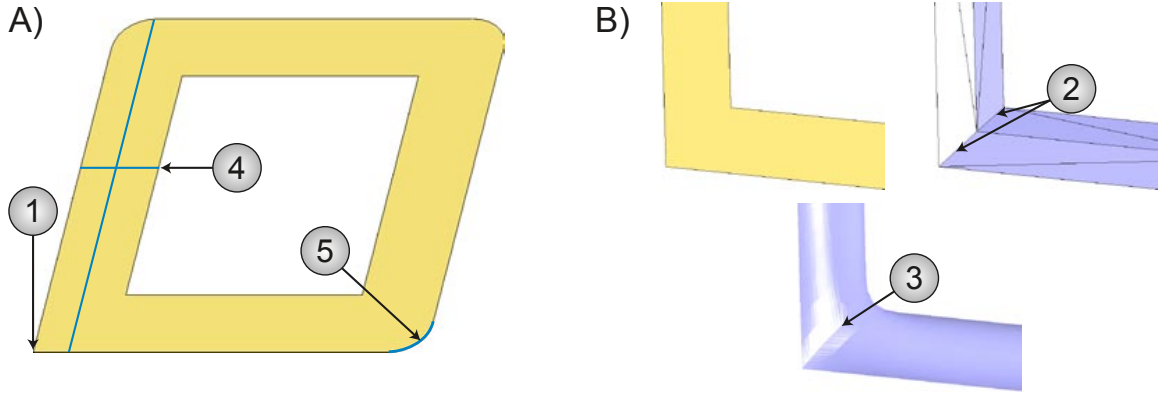


Abbildung 4.13 (A) Dieses Beispiel zeigt eine Fluidik-Bahn mit Ecken (1) und Rundungen (5), sowie stark unterschiedlichen Größenverhältnissen Bahnbreite : Bahnlänge (4). (B) Werden im Rohmodell des Benutzers Kanten (2) in eine Symmetrieebene gelegt, so verbleiben sie dort während der Evolution mit elementaren Befehlen und führen zu unrealistischen Ergebnissen (3). Solche Schwierigkeiten können durch angepasste Modellierung des Rohmodells oder den Einsatz fortgeschrittener Befehle umgangen werden.

Evolver besitzt zwei Routinen um die Geometrie mit minimaler Energie zu finden: Das Verfahren des steilsten Abstieges (*gradient descent*) variiert die Geometrie entlang des steilsten Energieabfalls $-\vec{G}$ und konvergiert relativ langsam [Bronstein99]. Das Newton-Verfahren nutzt die Hesse-Matrix \mathbf{H} und konvergiert innerhalb weniger Iterationen. Allerdings muss dafür \mathbf{H} positiv definit sein, d.h. für alle \vec{Y} ist $\vec{Y}^T \mathbf{H} \vec{Y} > 0$. Dies ist das mehrdimensionale Analogon zum eindimensionalen Test eines lokalen Minimums mit der zweiten Ableitung. Die Anwendung des Newton-Verfahrens beschränkt sich laut [Bronstein99] auf ein System, das ohnehin nah am Energieminimum liegt.

Die Startgeometrie und entsprechende Randbedingungen werden vom Benutzer implementiert (Rohmodell). Die Evolution der Geometrie besteht im einfachsten Fall aus wechselseitigem Verfeinern der Diskretisierung (Befehl *r*) und Veränderung der Geometrie entlang des steilsten Energieabfalls (Befehl *g*). Bei der Verfeinerung wird jedes Dreieck durch Einfügen von Zwischenpunkten auf den Kantenmitten der Dreiecke in vier kleinere Dreiecke zerlegt. Der Gradientenabstieg führt zu einer schrittweisen Annäherung an die Oberfläche minimaler Energie. Abschließend werden mit dem Befehl *hessian* Iterationen des Newton-Verfahrens vollzogen, bis sich das System im lokalen Minimum befindet. Ein Beispiel freier Oberflächen soll den Vorgang erläutern und grundlegende Probleme verdeutlichen.

Im Experiment wird die in Abb. 4.13A dargestellte Substratfläche hydrophil moduliert. Die Gestaltung des Rohmodells ist als essentieller Schritt zu betrachten, wie am Beispiel der Ecke (1) erkennbar wird. Definiert man das Rohmodell für diese Ecke wie in Abb. 4.13B so, dass der innere und äußere Eckpunkt direkt über die Diagonalen (2) verbunden ist, dann ergibt sich ein unrealistischer Knick (3) im Endmodell. Dies kann damit begründet werden, dass die Diagonalen in einer Symmetrieebene liegen, die sie bei der Evolution nicht verlassen. Solche Kanten in Symmetrieebenen sind i.a. vermeidbar, wie in Abb. 4.14A (1) für das Beispiel der Ecke. Weiterhin besitzt die Fluidik-Bahn in Abb.

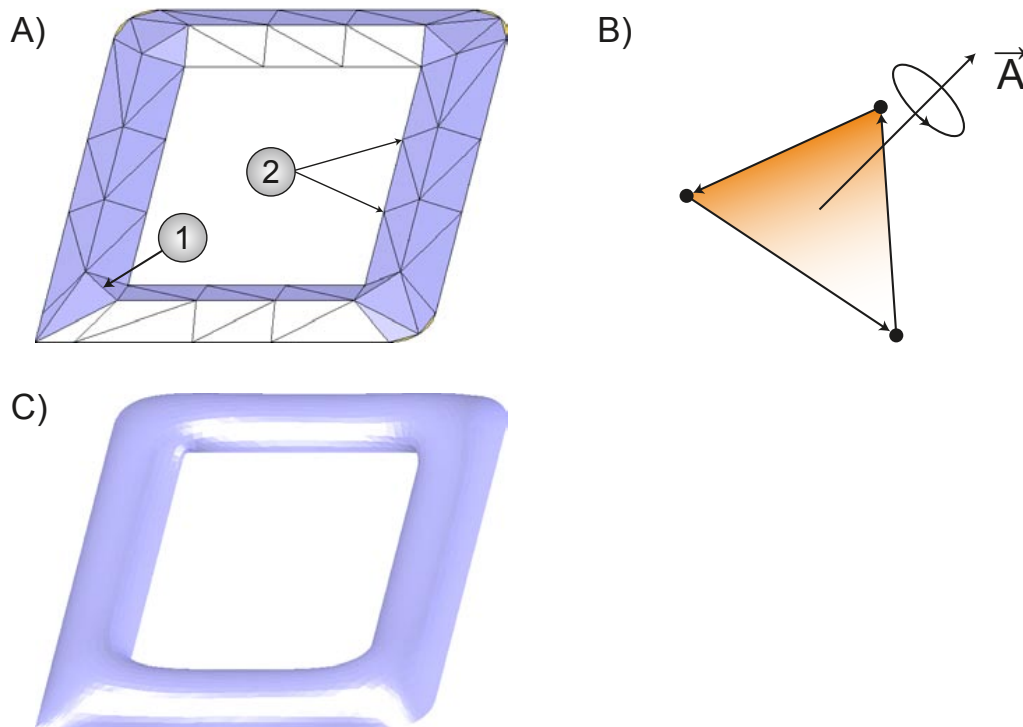


Abbildung 4.14 (A) Eine umsichtige Definition vermeidet Kanten in Symmetrieebenen (1) und unterteilt lange Wegstrecken in Segmente (2) damit Dreiecke beim Verfeinern nicht verzerrt werden. (B) Auf Basis von Punkten und Pfeilen werden Flächenelemente definiert, deren Normalenvektor aus dem Umlaufsinn der Pfeile mit der rechten-Hand-Regel bestimmt wird. (C) Ein derart vorbereitetes Rohmodell führt zu einem Endmodell, das als gute Approximation der Realität angenommen werden kann.

4.13A extreme Größenverhältnisse (4) mit Bahnbreite : Bahnlänge $\leq 1/5$, die bei fortwährender Verfeinerung zu stark verzerrten Dreiecken führen. Für einen problemlosen Import in COMSOL Multiphysics benötigt man eine Oberfläche, deren Dreiecke möglichst drei ähnlich große Winkel und Seiten besitzen. Es zeigt sich, dass die Zerlegung langer Seiten in Abb. 4.14A in mehrere Segmente (2) die Ähnlichkeit der Dreieckswinkel des Rohmodells erheblich verbessert. Diese Vorgaben sind hauptsächlich zu beachten, wenn nur die elementaren Befehle *g* und *r* eingesetzt werden. In Anhang A.7 werden fortgeschrittene Befehle des Surface Evolver erläutert, mit denen gleichmäßige Dreiecke in präzisen Modellen erzeugt werden können, ohne spezielle Anforderungen an das Rohmodell stellen zu müssen.

Nach diesen prinzipiellen Anmerkungen zum Aufbau eines Rohmodells bleibt nur noch dessen Definition. Zunächst müssen alle Dreieckspunkte definiert werden. Dies kann auch durch Verwendung beliebiger, parametrisierter Funktionen (*boundaries*) erfolgen, was erhebliche Vorteile birgt. Werden die runden Ecken (5) in Abb. 4.13A parametrisiert, so können auch beim Verfeinern des Rohmodells die Zwischenpunkte wieder auf die Kurve gezwungen werden, wodurch man im Endmodell runde Ecken erhält. Wie in Abb. 4.14B dargestellt werden die definierten Punkte (*vertices*) mit Pfeilen (*edges*) verbunden und zu Flächenelementen (*faces*) zusammengeschlossen. Der Normalenvektor \vec{A} der Flächenelemente wird durch die rechte-Hand-Regel und den Umlaufsinn

der Pfeile definiert. Es ist zu beachten, dass alle Normalenvektoren aus dem Volumen herauszeigen müssen, um korrekte Ergebnisse mit dem Surface Evolver zu erzielen. Die Punkte und Pfeile des benetzten Randes (Abb. 4.13A) müssen als *fixed* definiert werden, damit sie während der Evolution nicht verschoben werden, was der ersten Randbedingung des Experiments entspricht. Die Flächenelemente der benetzten Substratoberfläche hält man mit einer Zwangsbedingung (*constraint*, z.B. $x_3 = 0$) in einer Ebene. Abschließend generiert man aus allen Flächenelementen einen Volumenkörper (*body*), der mit der experimentellen Volumen-Zwangsbedingung (*volume*) belegt wird, die vom Surface Evolver dann umgesetzt wird. Bei Bedarf kann noch die Gravitation berücksichtigt werden, wobei diese i.a. in der Mikrofluidik vernachlässigbar ist, weil sie von der Oberflächenspannung dominiert wird.

Innerhalb weniger Minuten errechnet der Surface Evolver für die Beispielbahn die Fluidoberfläche nach Abb. 4.14C. Für die geringe SAW-Leistung (und damit Acoustic Streaming-Volumenkraft) der in diesem Kapitel vorgestellten Experimente wird die Oberfläche nicht zusätzlich verzerrt und die berechneten Modelle können als gute Näherung der Flüssigkeitsgeometrie im Experiment angesehen werden. Hohe SAW-Leistung, wie sie bei der Bewegung von Tropfen nötig ist, deformiert die Oberfläche signifikant [Schindler06] und müsste im Surface Evolver zusätzlich betrachtet werden.

Das FEM-Modell für COMSOL Multiphysics wird als 3d-CAD-Datei im VRML-Format erzeugt. Werden nur die elementaren Befehle *r* und *g* verwendet, so sind für diese Datei maximal zwei bis drei Verfeinerungsschritte zu wählen. Ansonsten kommt es oft zu Problemen beim Import in COMSOL Multiphysics in Kapitel 4.4.4. Um nicht nur mit groben Modellen in COMSOL Multiphysics arbeiten zu können, sind in Anhang A.7 fortgeschrittene Methoden für den Aufbau präziser Modelle erläutert, die in COMSOL Multiphysics importiert werden können. Für die Raytracing-Anwendung kann das Modell im Prinzip beliebig verfeinert werden, generell reichen aber vier bis fünf Verfeinerungsschritte aus. Der Export des Raytracing-Modells erfolgt als eine Liste aller Dreiecke im Mathematica 4.0 NB-Format (siehe Anhang A.7).

4.4.2 Berechnung des SAW-Schallpfad-Profiles

Wie in Kapitel 4.3 dargelegt, benötigt man für das Raytracing der Acoustic Streaming-Volumenkraft die SAW-Intensität $|A_0|^2$ beim Eintritt der SAW unter das Wasser. Die Methode zur Bestimmung der Intensitätsverteilung im Schallpfad (Schallpfad-Profil) wird in diesem Abschnitt vorgestellt. Von der Verwendung der in [Streibl00] entwickelten Software wurde abgesehen, da diese die Slowness-Kurve parabolisch annähert, was für LiNbO₃ 128° rot Y-Cut nur in einem kleinen Winkelbereich möglich ist ([Oliner73] S256, [Laude04], Anhang A.2). Stattdessen wird den Erläuterungen von [Visintini90] folgend ein Programm zur Berechnung des Schallpfad-Profiles für LiNbO₃ 128° rot Y-Cut und LiNbO₃ Y-Cut implementiert. Im folgenden Abschnitt wird kurz der Lösungsweg skizziert, wie er in [Visintini90] ausführlich behandelt wird. Bei eigenen Rechnungen wird jeweils auf den Anhang verwiesen.

Zunächst sei angemerkt, dass die Rechnungen im Koordinatensystem x, y, z stattfinden, wobei die z -Richtung gleich der Schnittachse ist. Für LiNbO₃ 128° rot Y-Cut ist dann $x = X$, $y = \perp X$, und für LiNbO₃ Y-Cut gilt $x = X$, $y = Z$ (vgl. Abb. 2.2C). Das Oberflächenpotential der Welle $\phi(x, y)$ im Ortsraum lässt sich aus dem Faltungsintegral der Greenschen Funktion G und der Ladungsdichteverteilung ρ über die gesamte (x', y') -Ebene B berechnen:

$$\phi(x, y) = \int_B G(x - x', y - y') \rho(x', y') dx' dy' \quad (4.46)$$

Die Fourier-Transformierte $\tilde{\phi}$ erhält man also durch Multiplikation von \tilde{G} und $\tilde{\rho}$. Es liegt demnach nahe, ϕ durch seine Fourier-Transformierte $\tilde{\phi}$ auszudrücken:

$$\phi(x, y) = \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{G}(k_x, k_y) \tilde{\rho}(k_x, k_y) \exp[-i(k_x x + k_y y)] dk_x dk_y \quad (4.47)$$

Geht man zu Polarkoordinaten (k, θ) über, so kann die 2d-Fourier-Transformierte $\tilde{G}(k_x, k_y)$ durch Rotation der 1d-Fourier-Transformierten um θ berechnet werden. Die beiden Größen \tilde{G} und $\tilde{\rho}$ bestehen aus drei Teilen:

$$\tilde{G} = \underbrace{\tilde{G}^{el}}_{\text{elektrostat. Potential}} + \underbrace{\tilde{G}^{SAW}}_{\text{SAW-gekoppeltes Potential}} + \underbrace{\tilde{G}^{BAW}}_{\text{BAW-gekoppeltes Potential}} \quad (4.48)$$

$$\tilde{\rho} = \underbrace{\tilde{\rho}^{el}}_{\text{elektrostat. Ladungsdichtevert.}} + \underbrace{\tilde{\rho}^{SAW}}_{\text{SAW-induzierte Ladungsdichtevert.}} + \underbrace{\tilde{\rho}^{BAW}}_{\text{BAW-induzierte Ladungsdichtevert.}} \quad (4.49)$$

Der Term \tilde{G}^{el} ist nur in der Nähe der IDTs wichtig. Die Terme \tilde{G}^{BAW} und $\tilde{\rho}^{BAW}$ für angeregte Volumenwellen sind vernachlässigbar. $\tilde{\rho}^{SAW}$ zeigt sich in einer Dispersion der

Phasengeschwindigkeit und wird durch die Slowness-Kurve berücksichtigt:

$$\phi(x, y) = \frac{1}{4\pi^2} \int_{\theta_0}^{\theta_0+\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{G}^{SAW}(k, \theta) \tilde{\rho}^{el}(k, \theta) \exp[-i k (x \cos \theta + y \sin \theta)] |k| dk d\theta \quad (4.50)$$

Die Berechnung von \tilde{G}^{SAW} durch Drehung der 1d-Approximation von Ingebrigtsen [Baghai87] um den Winkel θ und Anwendung der Cauchy-Integralformel liefert:

$$\phi(x, y) = -i \frac{1}{2\pi} \int_{\theta_0}^{\theta_0+\pi} \tilde{G}_S(\theta) \tilde{\rho}^{el}(k_0, \theta) \exp[-i |x k_{0x}(\theta) + y k_{0y}(\theta)|] d\theta \quad (4.51)$$

Die Integration wurde also auf die relevanten Wellenvektoren $k_0(\theta)$ der Slowness-Kurve beschränkt, wobei $\tilde{G}_S(\theta)$ ein Maß für die Kopplung der SAW in Richtung θ ist. Mit k_{0y} als neuer Integrationsvariable ergibt sich:

$$\phi(x, y) = \frac{1}{2\pi} \int_{k_{0y}^{min}}^{k_{0y}^{max}} \tilde{S}(k_{0y}) \exp[-i |x k_{0x}(k_{0y}) + y k_{0y}|] dk_{0y} \quad (4.52)$$

$$\tilde{S}(k_y) = i \frac{\Gamma(k_y)}{\gamma(k_y)} \tilde{\rho}^{el}(k_y) = i \frac{\Gamma'(k_y)}{\varepsilon_p^\infty(k_y) \gamma(k_y)} \tilde{\rho}^{el}(k_y) \quad (4.53)$$

ε_p^∞ ist die dielektrische Oberflächenkonstante aus Anhang A.1 für den Grenzwert $\omega \rightarrow \infty$. In [Visintini90] wird trotz $\omega \rightarrow \infty$ die niederfrequente Form $\varepsilon_p^\infty = \varepsilon_p^T$ eingesetzt. Der Kopplungsfaktor $\Gamma(k_y) = \Gamma'(k_y) / \varepsilon_p^\infty(k_y)$ beschreibt die richtungsabhängige Kopplungsstärke. Die Größe $\gamma(k_y)$ ist ein Maß für die Anisotropie des Substrats. Diese Funktionen sind im Anhang in Abb. B.2 dargestellt. Die Gl. (4.52) wird als ASoW-Integral (*Angular Spectrum of Waves*) bezeichnet und wird in dieser Arbeit zur Bestimmung des Oberflächenpotentials herangezogen. Im Wellenspektrum $\tilde{S}(k_y)$ gehen die Materialeigenschaften der richtungsabhängigen Anregungsstärke und die individuelle Ladungsdichteverteilung ein, die durch die Art des IDTs bestimmt wird.

Prinzipiell unterscheidet man zwei Methoden zur Bestimmung der Fourier-Transformierten der Ladungsdichteverteilung $\tilde{\rho}^{el}$. Bei der Modellierung durch Überlappung wird das Feld zwischen den Fingern als Quelle der Anregung betrachtet, wohingegen bei der fingerorientierten Modellierung die Ladung auf einem Finger Quelle der Anregung ist. Beide Methoden sind gleichwertig ([Morgan85, Datta86]) und werden je nach Design eines IDTs und den zu berücksichtigenden Effekten bevorzugt eingesetzt.

Abhängig von der Geometrie des IDTs können Symmetrieeigenschaften genutzt werden, um die 2d-Ladungsdichteverteilung $\rho^{el}(x, y)$ im Ortsraum aus einer 1d-Ladungsdichteverteilung $\sigma(x)$ abzuleiten. Für einen normalen IDT nach Abb. 4.15A ergibt sich mit der Heavyside-Stufenfunktion H und der Funktion $\text{sinc}(x) = \sin(x)/x$ im Orts- und Wellenvektorraum:

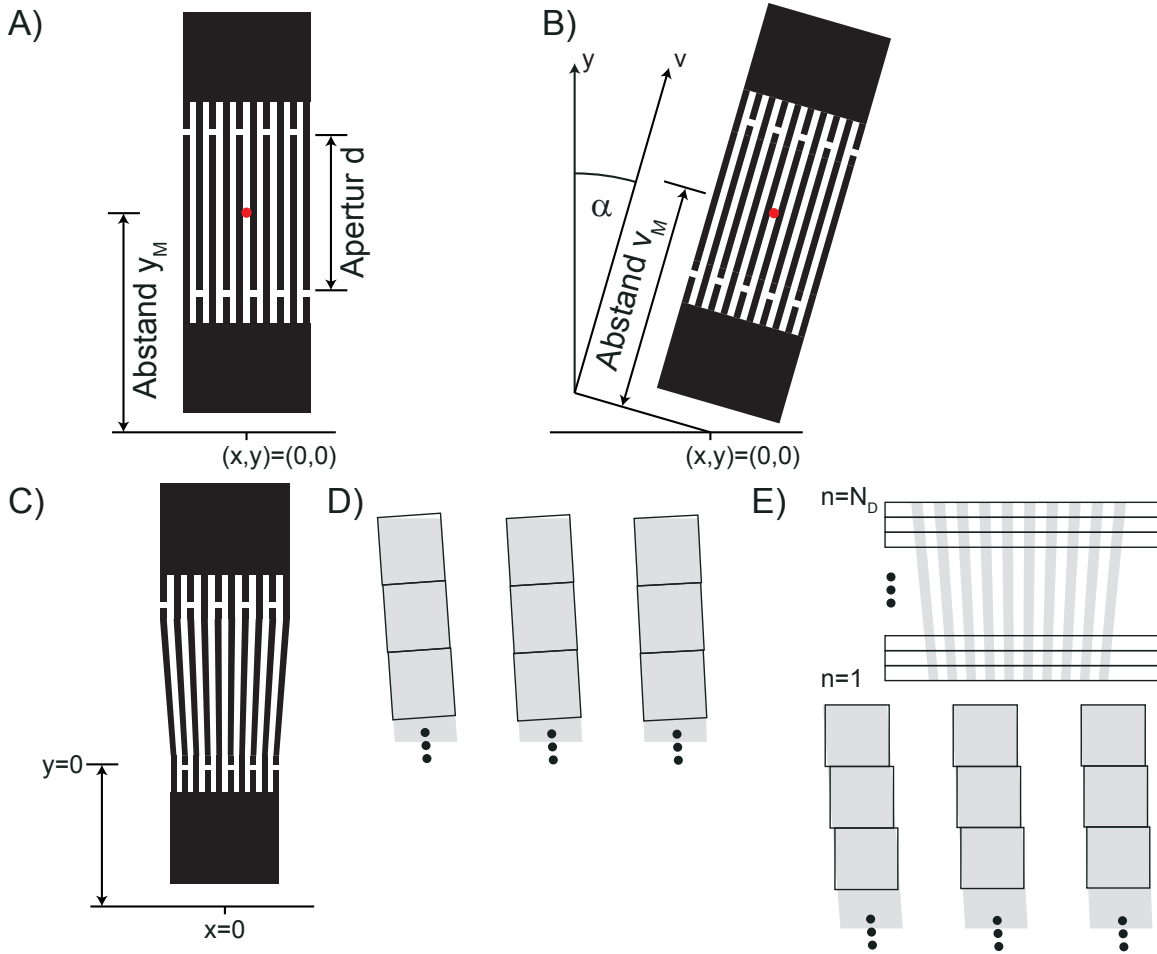


Abbildung 4.15 (A) Normaler IDT mit Ausrichtung entlang der Kristallachsen. (B) Normaler IDT mit Verkipfung gegen die Kristallachsen um den Winkel α . (C) IDT mit verjüngendem Schallpfad (TIDT). (D) Zerlegung der Finger in einzelne gedrehte Elemente mit fingerorientierter Modellierung. (E) Zerlegung der Finger in N_D Elemente und Modellierung durch Überlappung ohne Berücksichtigung der lokalen Verkipfung.

$$\rho^{el}(x, y, y_M) = \sigma(x) (H(y - y_M + d/2) - H(y - y_M - d/2)) \quad (4.54)$$

$$\tilde{\rho}^{el}(k_y, y_M) = d \tilde{\sigma}(k_x(k_y)) \text{sinc}(k_y d/2) \exp(i k_y y_M) \quad (4.55)$$

Für einen IDT mit unendlich vielen Fingerpaaren gibt es eine überlappungsbasierte, analytische Lösung $\sigma(x) = \sigma_{inf}(x)$ nach [Engan69]. In Anhang A.3 wird auf Basis dieses Ausdrucks eine Näherung $\tilde{\sigma}^{gap}(k_x)$ der exakten numerischen Lösung für endliche IDTs abgeleitet. Mit $\tilde{\sigma}^{gap}(k_x)$ aus Gl. (A.12) lässt sich das ASoW Integral (4.52) eines endlichen, normalen IDTs berechnen mit:

$$\tilde{\rho}_{IDT}^{el}(k_y, y_M) = d \tilde{\sigma}^{gap}(k_x(k_y)) \text{sinc}(k_y d/2) \exp(i k_y y_M) \quad (4.56)$$

Für einen um den Winkel α gedrehten IDT in Abb. 4.15B, wie er z.B. bei Verkipfung gegen die Kristallachsen des Substrats auftritt, verändert sich auch das Wellenspektrum (4.53):

$$k_u(k_y) = k_x(k_y) \cos \alpha - k_y \sin \alpha$$

$$k_v(k_y) = k_x(k_y) \sin \alpha + k_y \cos \alpha$$

$$\tilde{\rho}_{rotIDT}^{el}(k_y, y_M) = d \tilde{\sigma}^{gap}(k_u(k_y)) \operatorname{sinc}(k_v(k_y) d/2) \exp(i k_v(k_y) v_M) \quad (4.57)$$

$$\tilde{S}_{rotIDT}(k_y) = i \frac{\Gamma'(k_y)}{\varepsilon_p^\infty(k_y) \gamma(k_y)} \tilde{\rho}^{el}(k_y, v_M) \quad (4.58)$$

In Abb. 4.15C ist ein TIDT dargestellt, dessen Periode entlang der Apertur variiert. Dadurch erhält man für jeden Finger einen anderen Anstellwinkel. Damit eröffnen sich zwei Möglichkeiten zur Modellierung. Auf Basis der fingerorientierten Modellierung ([Morgan85, Datta86]) kann jeder Finger einzeln berechnet werden. Dazu wird, wie in Abb. 4.15D skizziert, der Finger in gedrehte einzelne Elemente zerlegt. Diese Modellierung berücksichtigt die veränderliche Periode entlang der Apertur und die Verkipfung der Elektroden. Dieses Verfahren ist mit erheblichem Rechenaufwand verbunden und wird meistens herangezogen, wenn Widerstandseffekte der Finger berücksichtigt werden. Im Gegensatz dazu kann durch feine Diskretisierung der Apertur d in N_D Elemente, wie in Abb. 4.15E dargestellt, die Änderung der Periode innerhalb des Segments vernachlässigt werden. Dadurch kann das Segment durch eine Überlappung der Breite d/N_D simuliert werden, wodurch die Verkipfung vernachlässigt wird. Die Ladungsdichte des gesamten TIDT wird also durch eine Summe von Überlappungen berechnet:

$$\tilde{\rho}_{TIDT}^{el}(k_y) = \frac{d}{N_D} \operatorname{sinc}\left(k_y \frac{d}{2N_D}\right) \sum_{n=1}^{N_D} \tilde{\sigma}_n^{gap}(k_x(k_y)) \exp\left(i k_y \frac{(2n-1)d}{2N_D}\right) \quad (4.59)$$

Der Index n an der Ladungsdichte der Überlappung zeigt hierbei, dass diese von n abhängt, da die Elektrodenperiode λ entlang der Apertur variiert. Wie in Gl. (4.56) bezeichnet der exp-Term die Verschiebung des Segments in y -Richtung. Der Ausdruck (4.59) wird in dieser Arbeit zur Berechnung des ASoW-Integrals (4.52) für TIDTs verwendet.

In Anhang A.4 werden die überlappungsbasierten Lösungen (4.59) und (4.56) mit einer punktuellenbasierten Modellierung (ähnlich [Streibl00]) für normale IDTs und TIDTs verglichen. Es ergibt sich, dass die Schallpfad-Profile unterschiedlicher Modellierung hervorragend übereinstimmen. Dabei ist der Rechenaufwand der überlappungsbasierten Lösung etwa 500mal geringer als bei punktuellenbasierter Modellierung.

Damit steht eine Technik zur Verfügung, um am Ort $\vec{r} = (x, y)$ die SAW-Intensität $|A_0(x, y)|^2 = |\phi(x, y)|^2$ für LiNbO₃ zu bestimmen, ohne Approximationen der Slowness-Kurve und unter Einbeziehung der richtungsabhängigen Anregungsstärke. Diese Methoden wurden in Mathematica 4.0 überlappungsbasiert für die Berechnung normaler IDTs (mit evtl. Verkipfung in „NIDT-GAP.nb“) und TIDTs (in „TIDT-GAP.nb“) auf LiNbO₃ Y-Cut und LiNbO₃ 128° rot Y-Cut implementiert. Die punktuellenbasierte Modellierung ist in „TIDT-PKT.nb“ programmiert, wobei als Grenzfall der normale IDT simuliert werden kann. Zur Konvertierung und Normierung der berechneten Schallpfad-Profile für die SAW-Raytracing-Anwendung dient das Programm „Konvertierung Raytracing.nb“.

4.4.3 Die SAW-Raytracing-Anwendung

In diesem Abschnitt laufen die Anstrengungen der letzten Abschnitte zusammen. Für das Beispielmmodell wurde in Kapitel 4.4.1 ein Raytracing-Modell erstellt und für Mathematica 4.0 als „facets_diss_suel_eckig.nb“ ausgegeben. Dieses Modell wird nun mit dem Programm „Modell aus Surface Evolver.nb“ in Mathematica 4.0 eingelesen, wo ein Ausschnitt des entwickelten Modells ausgewählt werden kann (siehe Abb. 4.16A). Im allgemeinen benötigt man gerade bei langen Wasserbahnen nicht das gesamte Raytracing-Modell, sondern vollzieht das Raytracing in einem Bereich von etwa 1 – 2 mm um die Stelle der SAW-Einkopplung. Der Ausschnitt wird als „diss_suel_eckig.txt“ für die SAW-Raytracing-Anwendung und als „diss_suel_eckig.nb“ für spätere Betrachtungen des Volumenkraftfelds in Mathematica 4.0 exportiert. Das im vorigen Abschnitt berechnete Schallpfad-Profil (Abb. 4.16B) liegt als „diss_suel_eckig_profil.txt“ vor.

Der Raytracing-Ansatz aus Kapitel 4.3 wurde in der SAW-Raytracing-Anwendung in Visual Basic implementiert. Das berechnete Schallpfad-Profil wird mittig um den Zentralpunkt $\vec{R}_{Zentral}$ ausgerichtet (vgl. Abb. 4.16A), wobei die Mitte des Schallpfad-Profiles aus der Position der beiden Punkte mit halber Intensität berechnet wird. Das Profil wird dann in Richtung \vec{e}_{Prop} extrapoliert, um lokal die SAW-Intensität berechnen zu können. Das Raytracing wird iterativ ausgewertet, indem der Strahl in Schritten der Länge d_{Ray} durch das Volumen verfolgt wird (siehe Abb. 4.16C) und an den Grenzflächenelementen des Raytracing-Modells reflektiert wird. Dazu wird das Volumen in Gitterelemente der Kantenlänge d_{ex} , d_{ey} und d_{ez} zerlegt und darin alle beinhalteten und angrenzenden Dreiecke des Raytracing-Modells in Ebenenform gespeichert (siehe Abb. 4.16D). Sobald der iterative Algorithmus eine neue Zelle betritt, wird für die lokalen Dreiecke überprüft, ob eine Reflexion stattfindet und gegebenenfalls durchgeführt. Dieses einfache Verfahren senkt die Rechenzeit drastisch, weil nicht alle Dreiecke des Raytracing-Modells auf Kollision geprüft werden. Zur Ermittlung des Volumenkraftfelds wird bei jedem Iterationsschritt entlang des Wegs $j_{ray}^{(n)}$ der Betrag der Kraft $\left| \vec{f}^{(n)}(j_{ray}^{(n)}) \right|$ nach Gl. (4.44) ausgewertet, mit dem aktuellen Ausbreitungsvektor des Strahls multipliziert und in das Gitterelement eingetragen. Wenn der Betrag der Kraft $\left| \vec{f}^{(n)}(j_{ray}^{(n)}) \right|$ unter einen prozentualen Schwellwert sinkt, stoppt der Algorithmus und fährt mit dem nächsten Strahl fort. Am Boden des Fluid-Reservoirs ermittelt das Programm einen Satz von Startpunkten für die Strahlen im Abstand d_{Quell} mit den zugehörigen Startwerten für die Kraft $\left| \vec{f}^{(n)}(j_{ray}^{(n)} = 0) \right|$, die nach Gl. (4.43) von der lokalen SAW-Intensität abhängen. In Ausbreitungsrichtung \vec{e}_{Prop} der SAW hängt die Anzahl an gestarteten Strahlen deshalb von der SAW-Intensität am Eintrittspunkt unter der Flüssigkeit ab (siehe Abb. 4.16D). Wenn alle Strahlen ausgewertet sind, befinden sich in den einzelnen Gitterzellen eine große Anzahl an gespeicherten Kraftvektoren. Das entgeltige Volumenkraftfeld erhält man durch Mittelung dieser Kraftvektoren in jeder Gitterzelle. Insofern ist es sinnvoll, die Schrittweite des Strahls im Volumen d_{Ray} und den Abstand der Strahlquellen d_{Quell} auf höchstens $1/5$ der minimalen Gittergröße $\min(d_{ex}, d_{ey}, d_{ez})$ festzulegen. Dann sind pro Gitterzelle eine ausreichende Menge an

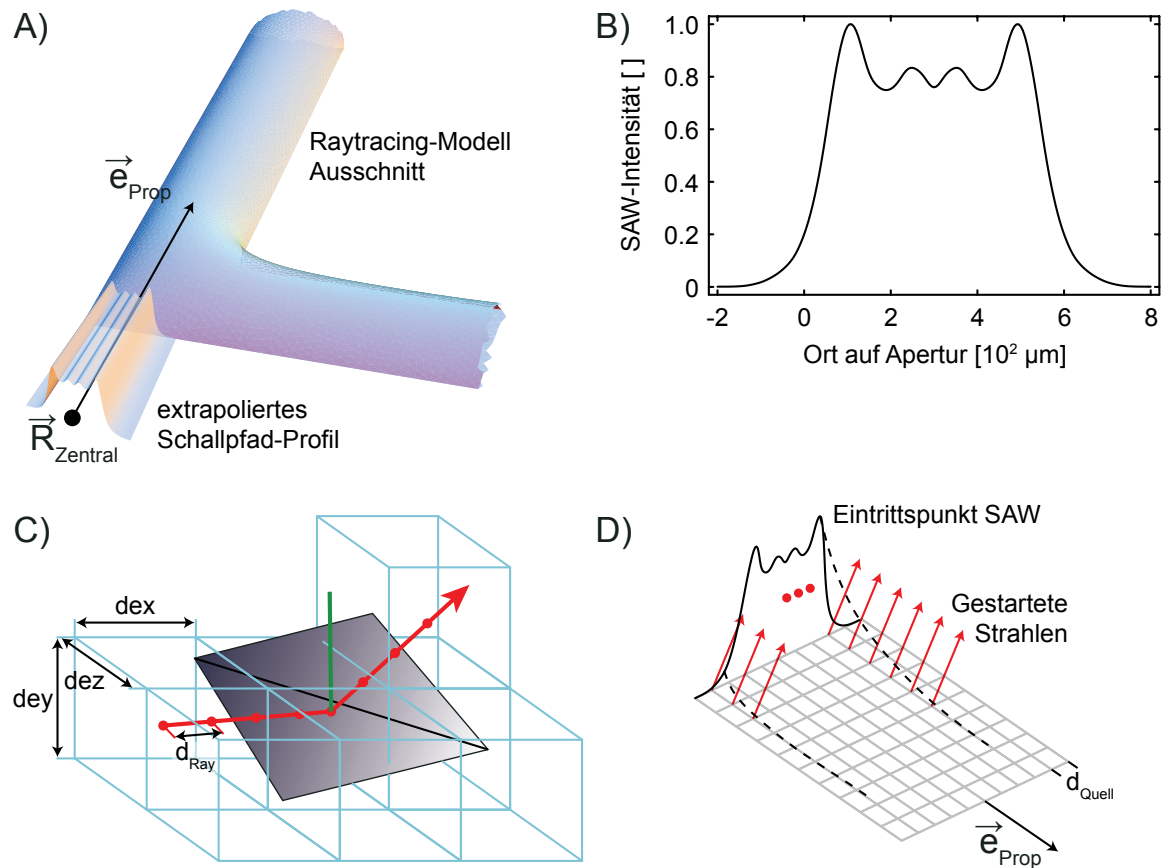


Abbildung 4.16 Vorbereitungen für das Raytracing: **(A)** Ein Ausschnitt der Beispielbahn wird für die SAW-Raytracing-Anwendung aufbereitet. Das Schallpfad-Profil der SAW-Intensität wird vom Zentralpunkt $\vec{R}_{Zentral}$ aus in Ausbreitungsrichtung \vec{e}_{Prop} der SAW extrapoliert. **(B)** Die SAW-Intensität aus Kapitel 4.4.2 wird ebenfalls für die SAW-Raytracing-Anwendung konvertiert. **(C)** Das Raytracing erfolgt in Iterationsschritten der Länge d_{Ray} mit Totalreflexion an den Grenzflächen. Hierfür wird das Volumen in Gitterzellen eingeteilt, welche die lokalen und angrenzenden Dreiecke des Raytracing-Modells in Ebenenform abspeichern. Jeder Strahlweg wird so durch das Volumen verfolgt und in jedem Iterationsschritt die Volumenkraft in die lokale Gitterzelle eingetragen. **(D)** Das Raytracing wird für einen Satz an Strahlen ausgeführt, deren Anzahl in Ausbreitungsrichtung von der jeweiligen SAW-Intensität am Eintrittspunkt abhängt.

Kraftvektoren für einen aussagekräftigen Mittelwert vorhanden.

Die Oberfläche der SAW-Raytracing-Anwendung ist in Abb. 4.17A dargestellt. Zunächst wird der Modellname „diss_suel_eckig“ in (1) eingetragen. Beim Betätigen der Taste „Importieren Modell“ (2) liest das Programm den gleichnamigen Ausschnitt des Raytracing-Modells ein und zeigt im Vorschaufenster eine Voransicht entlang der z -Achse an. Daraufhin wählt man in (3) die gewünschte Auflösung des Raytracing-Gitters aus. Insgesamt sollte dadurch die Volumendiskretisierung nicht wesentlich mehr als 300000 Zellen enthalten. Die Schaltfläche „Gitter/Ebenen“ (4) erzeugt dann dieses Gitter und speichert in den einzelnen Gitterzellen die zugehörigen und benachbarten Dreiecke des Raytracing-Modells in Ebenenform. Im Abschnitt Volumeneigenschaften werden nun bei (5) die entsprechenden Abmessungen in Einheiten von Gitterzellen angezeigt und auch die Modellabmessungen (Untergrenzen ux , uy , uz und Obergrenzen

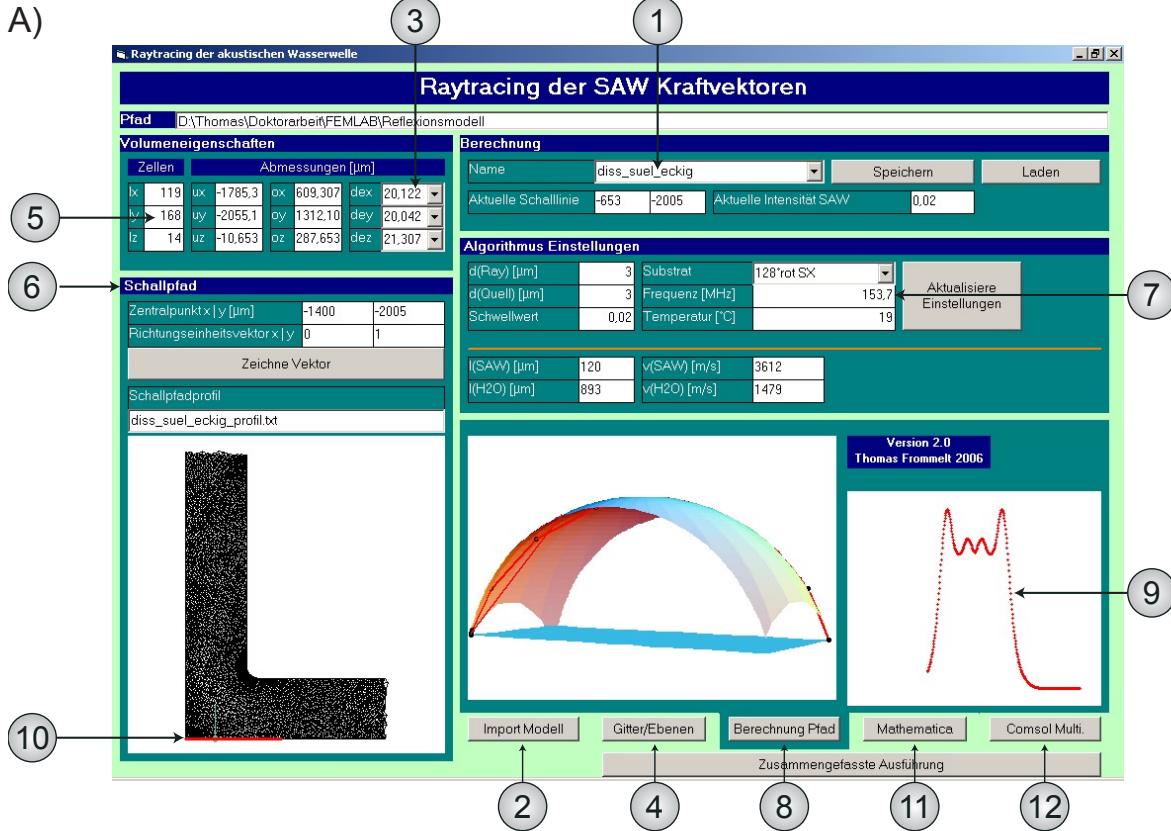


Abbildung 4.17 Über die Benutzeroberfläche der SAW-Raytracing-Anwendung wird das Beispielmodell verarbeitet (Erklärung der Nummern im Text).

zen ox , oy , oz in μm) werden nochmals angepasst. Jetzt wird vom Benutzer in (6) der Zentralpunkt des Schallpfad-Profiles $\vec{R}_{Zentral}$ und die Ausbreitungsrichtung \vec{e}_{Prop} der SAW angegeben, der mit der Taste „Zeichne Vektor“ auch in der Modellvorschau eingezeichnet werden kann. Der Dateiname des Schallpfad-Profiles wird vom Programm standardmäßig anhand des Modellnamens generiert. Im Algorithmus-Bereich (7) müssen nur noch die elementaren Parameter gesetzt werden und mit der Schaltfläche „Aktualisiere Einstellungen“ verrechnet werden. Die entsprechenden 1/e-Abklinglängen nach Gl. (4.27) und (4.41) und einzusetzende Schallgeschwindigkeiten erscheinen unterhalb. Die Geschwindigkeit der SAW wird dabei als konstant angenommen und entspricht dem in der gewählten Substratrichtung gängigerweise gemessenen Wert unserer Fluidikchips. Für Wasser wird die Schallgeschwindigkeit in [m/s] in Abhängigkeit von der Temperatur T in $^{\circ}\text{C}$ nach folgendem Ausdruck berechnet (Anhang Abb. B.1B, [Bilaniuk93, Bilaniuk96]):

$$v_{H_2O} = 1.40238744 \cdot 10^3 + 5.03836171 T - 5.81172916 \cdot 10^{-2} T^2 + 3.34638117 \cdot 10^{-4} T^3 - 1.48259672 \cdot 10^{-6} T^4 + 3.16585020 \cdot 10^{-9} T^5 \quad (4.60)$$

Die Taste (8) „Berechnung Pfad“ vollzieht dann das Raytracing der Kraftvektoren. Der Vorgang dauert umso länger, je geringer d_{Ray} , d_{Quell} und der Schwellwert gewählt werden und je größer die integrierte Intensität im Schallpfad-Profil ist. Insofern benötigen TIDTs weniger Rechenzeit als normale IDTs. Während des Raytracing wird

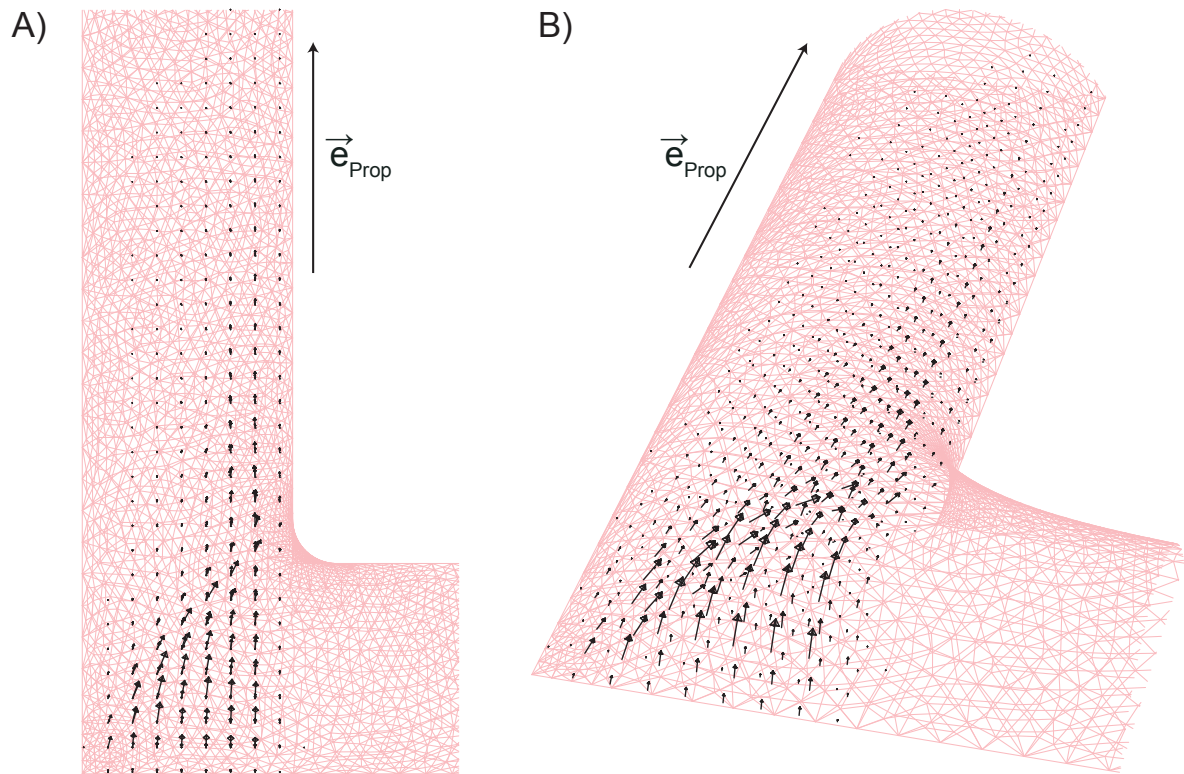


Abbildung 4.18 (A) In der Draufsicht des resultierenden Volumenkraftfelds erkennt man die Verkipfung der Kraftvektoren gegen die Ausbreitungsrichtung \vec{e}_{Prop} der SAW, die von der gekrümmten Oberfläche in der Kurve herrührt. (B) Die Schrägansicht enthüllt den komplexen Aufbau des Kraftfelds im Volumen.

die aktuelle SAW-Intensität am Eintrittspunkt im Diagramm (9) und der entsprechende Eintrittspunkt in der Modellvorschau (10) rot aufgetragen. Nach Beendigung der Berechnung kann das normierte Volumenkraftfeld zur Darstellung mit „Verarbeitung Ergebnisfeld.nb“ in Mathematica 4.0 exportiert (11) und die jeweiligen Dateien für COMSOL Multiphysics generiert werden (12). Die Einstellungen sollten in der Datenbank gespeichert werden, um jederzeit die Algorithmus-Einstellungen abrufen zu können. Mit der Laden-Taste kann eine vorhandene Konfiguration geladen werden, wobei dadurch noch kein Modell importiert oder Ebenen aufbereitet werden.

Für das Beispielmmodell ist das entsprechende Volumenkraftmodell in Abb. 4.18A in Draufsicht und 4.18B in Schrägansicht mit dem Programm „Verarbeitung Ergebnisfeld.nb“ gezeichnet. Hierbei ist das Gitter zum Zweck der Übersichtlichkeit der gezeichneten Kraftvektoren bewusst grob gewählt. Ein Gitter zur Simulation hätte etwa 1/4 dieser Kantenlänge. Man erkennt in der Draufsicht, wie die Kraftvektoren im Einkopplungsbereich durch die gekrümmte freie Oberfläche nach rechts von der Ausbreitungsrichtung der SAW abgelenkt werden. Die Schrägansicht zeigt die komplexe 3d-Zusammensetzung des Volumenkraftfelds. Mit den für COMSOL Multiphysics erzeugten Dateien kann nun im letzten Schritt die Simulation der Fluidik erfolgen.

4.4.4 Simulation der Fluidik in COMSOL Multiphysics

Im abschließenden Schritt wird das stationäre Strömungsprofil durch die Lösung der Stokes-Gleichung (4.9) mit der kommerziellen Software COMSOL Multiphysics ermittelt, die aktuell in der Version 3.2 vorliegt. Die wichtigen Vorarbeiten wurden dabei bereits erledigt.

Der Surface Evolver liefert das FEM-Modell als eine 3d-CAD-Datei im VRML Format, welche die Geometrie des Flüssigkeitsvolumens widerspiegelt. Aufgrund von Inkompatibilitäten im VRML Format zwischen COMSOL Multiphysics und Surface Evolver muss die entsprechende Datei zunächst in der 3d-CAD Software Solidworks (Version 2005 SP3.1) geöffnet und wieder gespeichert werden. Diese Datei kann nun in COMSOL Multiphysics importiert werden, wo nach entsprechender Analyse ein geschlossenes Volumenmodell zur Verfügung stehen sollte. In Abb. 4.19A ist das importierte Volumen für das Modellproblem zu sehen, anhand dessen der Surface Evolver in Abb. 4.14 illustriert wurde. Das Modell wurde von COMSOL Multiphysics an den Grenzlinien erkennbar in Gebiete geteilt. Fehler beim Import haben vielfältige Gründe. Die Importparameter (siehe Anhang A.6) müssen in der Regel angepasst werden, vor allem wenn Dreiecke im Modell des Surface Evolver zu stark verzerrt sind. Solche Probleme sind außerdem im Surface Evolver zu behandeln, wie in Kapitel 4.4.1, bzw. Anhang A.7 erklärt wird.

Daraufhin muss das Kraftfeld aus Kapitel 4.4.3 eingelesen werden. Für die drei kartesischen Komponenten f_i der Volumenkraft \vec{f} in der Stokes-Gleichung (4.9) liegt dann jeweils eine interpolierte Funktion $sawforce_i$ in COMSOL Multiphysics vor. Da dieses Kraftfeld auf eins normiert ist, benötigt man noch einen Skalierungsfaktor f_0 , der zur richtigen Geschwindigkeit im Reservoir führt. Im Volumen werden neben der Dichte (nach Tab. B.1) und der Viskosität des Wassers (nach Anhang Abb. B.1A) die Volumenkraftdichten gesetzt:

$$f_i = f_0 \text{ sawforce}_i(x, y, z) \quad (4.61)$$

An den Rändern des Volumens werden für Festkörpergrenzflächen Randbedingungen ohne Schlupf (*no slip*) und an freien Oberflächen ideale Gleitung (*slip*) definiert [Comsol05A]:

$$\left. \begin{aligned} u &= 0 && \text{no slip} \\ \vec{n} \cdot \vec{u} &= 0 \\ \vec{t}_j \cdot \mathbf{S} \vec{n} &= 0 \\ \mathbf{S} &= -p \mathbf{I} + \eta (\nabla \vec{u} + (\nabla \vec{u})^T) \end{aligned} \right\} \text{slip} \quad (4.62)$$

Hierbei bezeichnet \vec{n} den Normalenvektor, \vec{t}_j die beiden Tangentialvektoren, \mathbf{I} die Einheitsmatrix und \mathbf{S} den Spannungstensor. Alle vorkommenden Punkte werden laut Comsol Support [Magnard06] mit Druck Null belegt (Menu Physics > Point settings). Dadurch verschwindet in der betrachteten Region nicht der Druck, sondern es handelt sich vielmehr um einen numerischen Trick, der das Problem stabilisiert. Weiterhin müssen schwache Randbedingungen aktiviert werden (Menu Physics > Properties >

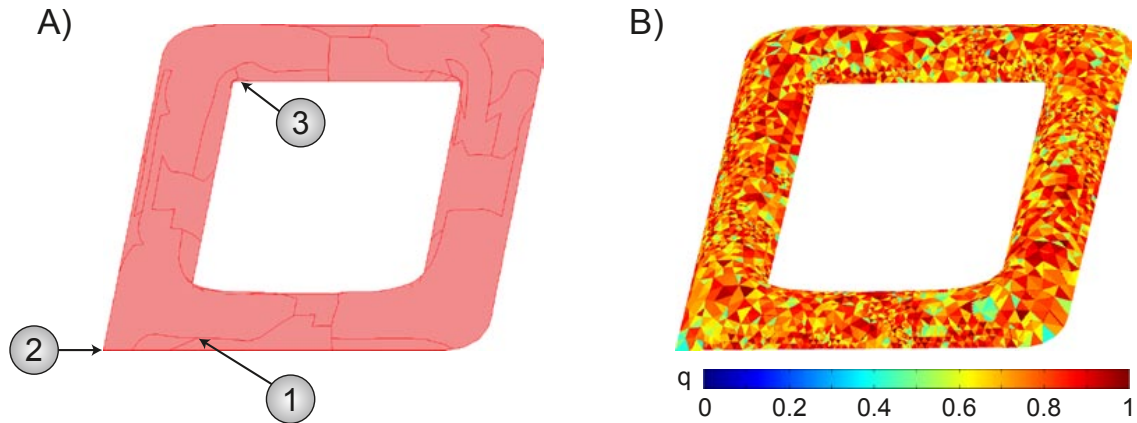


Abbildung 4.19 (A) COMSOL Multiphysics importiert das FEM-Modell und zerlegt das Modell in verschiedene Gebiete, die voneinander durch die dunkleren Linien getrennt sind. Bilden diese Gebiete spitze Winkel (1) oder flache Ecken (2), so kann die Qualität q des Gitters darunter leiden. An den Innenseiten entstehen kleine Gebiete (3). **(B)** Die Qualität des von COMSOL Multiphysics generierten Gitters lässt sich farblich darstellen, um Schwachpunkte zu finden.

Weak constraint $>$ Ideal), um Unstetigkeiten der Geschwindigkeit an den Grenzlinien zu vermeiden.

Nun generiert man mit COMSOL Multiphysics ein Gitter für das Volumen. Hierbei spielen die Grenzlinien in Abb. 4.19A eine entscheidende Rolle. Grenzlinien, die unter spitzem Winkel zusammenfallen (1), führen oft zu verzerrten Gitterelementen, genauso wie sehr flache Ecken (2). Diese Verzerrungen schlagen sich in einem niedrigen Qualitätsfaktor q dieser Elemente nieder [Comsol05B]:

$$q = \frac{72\sqrt{3}V}{(h_1^2 + h_2^2 + h_3^2 + h_4^2 + h_5^2 + h_6^2)^{1.5}} \quad (4.63)$$

Dabei bezeichnen die h_i die Seitenlängen der tetraedrischen Elemente und V deren Volumen. Wird die Qualität einzelner Elemente zu gering ($q \leq 0.15$), so kann es zu Fehlern und Abbruch des Lösungsvorgangs kommen („Inverted Mesh element“), dessen Folgen kaum abschätzbar sind. Die Abweichungen sind zumeist lokal um das betreffende Element, können aber auch die globale Strömung beeinflussen. Bei der Suche nach mangelhaften Gitterelementen hilft die farbliche Visualisierung der Elementqualität, wie sie in Abb. 4.19B für das ganze Modell dargestellt ist. In Anhang A.6 werden einige Richtlinien dargelegt, um die Gitterqualität zu optimieren und derartige Fehler in importierten FEM-Modellen zu vermeiden.

Abschließend verbleibt die Wahl des richtigen Löser. Bei 4GB Arbeitsspeicher kann man bis zu einer Anzahl von ca. $1.0 \cdot 10^5$ Freiheitsgraden die Löser SPOOLES oder UMFPACK zur schnellen, direkten Lösung des Problems verwenden. Bei mehr Freiheitsgraden kommt der langsamere, iterative Löser GMRES in Verbindung mit dem Vorkonditionierer *Incomplete LU* zum Einsatz. Dieser bereitet die spärlich besetzte Matrix des linearen Gleichungssystems vor und verfügt über einen Steuerparameter q_{LU} , der die Qualität der Vorkonditionierung reguliert. Für $q_{LU} \approx 10^{-5}$ benötigt Incomplete LU sehr viel Speicher, erzielt aber hervorragende Vorkonditionierung, die zu einer

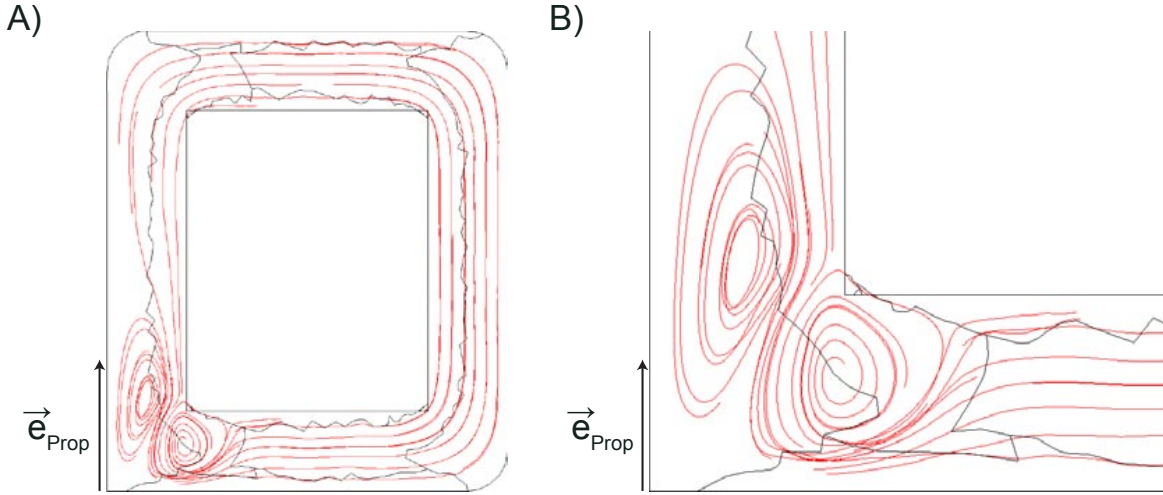


Abbildung 4.20 Ergebnisse der Beispielsimulation: **(A)** In COMSOL Multiphysics wird in nur einer Minute die Strömung in der Bahn simuliert. **(B)** In der Einkopplungsregion der SAW befinden sich zwei Wirbel, zwischen denen die Strömung verkippt zur Ausbreitungsrichtung \vec{e}_{Prop} der SAW fließt.

schnellen Konvergenz des iterativen Löfers GMRES führt. Mit schlecht vorkonditionierten Matrizen $q_{LU} \approx 0.2$ kann man riesige Modelle mit mehr als $5 \cdot 10^5$ Freiheitsgraden simulieren, besitzt aber keine Gewissheit, ob der Algorithmus tatsächlich konvergiert.

Tatsächlich benötigt man aber selten eine derart feine Gitterdiskretisierung. Das Beispielmmodell in Abb. 4.20A benötigt mit SPOOLES etwa 65s Rechenzeit. In der Einkopplungsregion der SAW in Abb. 4.20B entstehen so zwei Wirbel, zwischen denen das Strömungsprofil verkippt zur Ausbreitungsrichtung \vec{e}_{Prop} der SAW verläuft. Diese Verkipfung ist bereits in Abb. 4.18A deutlich erkennbar und eine direkte Folge des Raytracing. In Simulationen mit den bisher verwendeten Ansätzen konnte diese Verkipfung nicht beobachtet werden. Inwiefern diese neuen Erkenntnisse der SAW-Raytracing-Simulation die realen Strömungsprofile widerspiegeln, wird nun in einer Serie von Experimenten kontrolliert. Diese besitzen $1.1 - 1.8 \cdot 10^5$ Freiheitsgrade und werden mit GMRES und Incomplete LU ($q_{LU} = 10^{-2}$) innerhalb von 5 – 10 min gelöst.

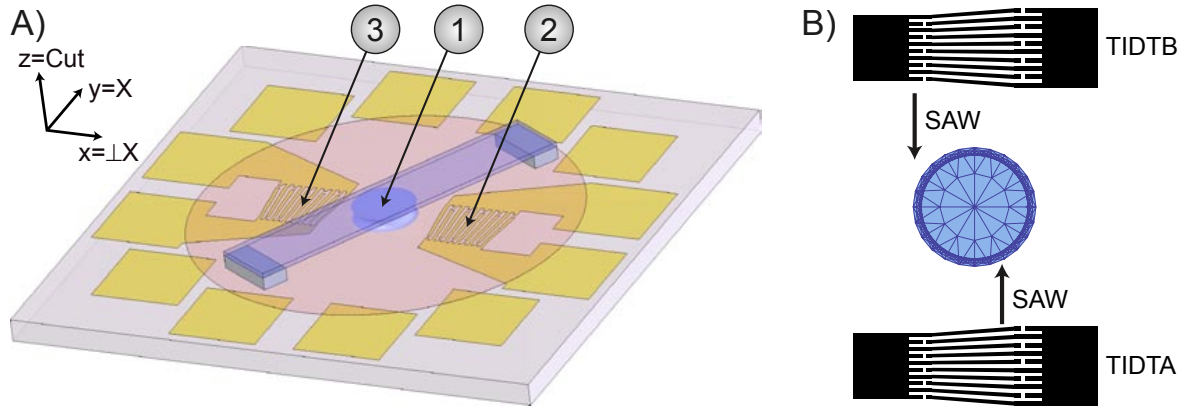


Abbildung 4.21 Experimente im Katenoid: **(A)** Auf das Katenoid-förmige Wasserreservoir **(1)** kann beidseitig mit den Schallwandlern TIDTA **(2)** und TIDTB **(3)** eingewirkt werden (Probenfoto im Anhang Abb. B.5B). **(B)** Die TIDTs decken die gesamte Grenzfläche des Katenoids ab und erlauben die exakte Positionierung des Schallpfads.

4.5 Simulation ausgewählter Experimente

4.5.1 Katenoid-Reservoir mit Deckel und freiem Rand

Dieser Abschnitt beschäftigt sich zunächst mit einem Katenoid-förmigen Wasserreservoir, um die Beobachtungen von Daniel Gogel aus Kapitel 4.2.1 zu verifizieren. Der Anteil an freien Oberflächen ist wegen der geringen Meniskusfläche im Katenoid klein. Dennoch werden wir in diesem Abschnitt zeigen, dass sie für die Strömung eine entscheidende Rolle spielen.

Der Wasser-Katenoid wird durch hydrophile Modifizierung einer $\varnothing 1.4\text{ mm}$ Kreisfläche am Boden und einem Quartz-Glasdeckel im Abstand von etwa $h = 300 \pm 10\text{ }\mu\text{m}$ (gemessen mit Mikroskop) von der Bodenfläche gebildet ((1) in Abb. 4.21A). Der Katenoid bildet sich bei der Befüllung mit $V_{H_2O} = 0.33\text{ }\mu\text{l}$ Wasser und ($r_P = 2.3\text{ }\mu\text{m}$)-Beads aus. Die Beads dienen der Visualisierung der Strömungsprofile nach Kapitel 3.1.7. Mit den Schallwandlern TIDTA (2) und TIDTB (3) (Konfiguration TIDT1 in Tab. B.2) kann das Fluid-Reservoir von beiden Seiten mit SAWs erreicht werden (siehe Abb. 4.21B), wobei in diesen Experimenten immer nur TIDTA aktiv ist. Die Position des Schallpfads lässt sich durch Variation der Frequenz justieren (siehe Gl. (2.21)) und bewirkt positionsabhängige Strömungsprofile im Katenoid. Ein TIDT wird mit dem Rhode & Schwarz SML01 betrieben, an dem die Frequenz auf 0.1 Hz genau eingestellt werden kann.

Sowohl das FEM-Modell als auch das Raytracing-Modell werden mit den in Anhang A.7 beschriebenen Methoden ermittelt, um die Genauigkeit der Simulation zu maximieren. Für die SAW-Raytracing-Anwendung werden die notierten Versuchsparameter in Tab. 4.1 eingesetzt. Bei der Temperatur T_{Ray} wird stets der Mittelwert zwischen der Kühltemperatur des Probensockels bei 17°C und der Umgebungstemperatur 23°C eingesetzt, die vom Quartz-Glasdeckel angenommen wird. Dieser ist vom Chip durch die Abstandshalter aus Klebeband gut thermisch entkoppelt. Das verwendete Substrat

Exp.	Frequenz f [MHz]	Zentralpunkt $\vec{R}_{Zentral}$ [μm]	Richtung \vec{e}_{Prop} []	Distanz TIDT- Katenoid [μm]
(A)	141.6	(678, -2)	(-1, 0)	1293
(B)	147.6	(669, 309)	(-1, 0)	1330
(C)	153.6	(670, 595)	(-1, 0)	1694
(D)	147.6	(669, 309)	(-1, 0)	1330
(E)	153.6	(670, 595)	(-1, 0)	1694

Tabelle 4.1 Experimentelle Parameter für die SAW-Raytracing-Simulation zur Simulation von Experimenten im Katenoid-förmigen Fluid-Reservoir.

ist immer „128° rot SX“ (\perp X-Richtung von LiNbO₃ 128° rot Y-Cut), die Schrittweiten belaufen sich auf $d_{Ray} = d_{Quell} = 2 \mu\text{m}$ bei Gitterabmessungen von ca. $15 \mu\text{m}$ und der Schwellwert wird einheitlich bei 0.02 gesetzt. Die Schallpfadberechnungen erfolgen dabei stets unter Verwendung der dielektrischen Oberflächenkonstante ε_P^S nach Anhang A.1 und B.3. Die x-Koordinate des Zentralpunkts $\vec{R}_{Zentral}$ wird jeweils jenseits der Obergrenze des Raytracing-Modells definiert, sodass die Startpunkte für das extrapolierte Schallpfad-Profil stets außerhalb des Raytracing-Modells liegen. Die y-Koordinate entspricht $p(f)$ aus Gl. (2.21). Hierzu wird die Wellenlänge $\lambda(f)$ aus der Frequenz mit der Schallgeschwindigkeit in der entsprechenden Substratrichtung (3612 m/s für 128° rot SX, 3828 m/s für 128° rot X) nach Gl. (2.20) berechnet. Die Schallgeschwindigkeiten unterscheiden sich von v_s nach Tab. 2.1 z.B. aufgrund des Massenbelags durch die SiO-Schutzschicht. Der Richtungsvektor \vec{e}_{Prop} wird einheitlich gewählt. Die Verkipfung der experimentellen Bilder um bis zu 1° wird durch entsprechende Drehung derselben korrigiert, sodass die Ausbreitungsrichtungen in Experiment und SAW-Raytracing-Anwendung zusammenfallen.

Für jedes Experiment werden das Volumenkraftfeld, das Schallpfad-Profil, das experimentell beobachtete Strömungsprofil von Daniel Gogel und die Überlagerung dieses Bildes mit den simulierten Strömungslinien aus COMSOL Multiphysics angegeben. Für die Darstellung des Volumenkraftfelds wird eine vergrößerte Fassung gewählt, um die Anzahl an Kraftvektoren übersichtlich zu halten. Die Zellengrößen dex , dey und dez des zur Simulation herangezogenen Feldes sind jeweils etwa 2.7-mal geringer. Analog wird die geometrische Darstellung des Katenoids gegenüber dem Raytracing-Modell vergrößert. Die experimentellen Bilder sind zur Kontrastverbesserung tonwertkorrigiert. Im experimentellen Bild werden die Partikeltrajektorien kurz unterhalb des Glasdeckels aufgenommen. Deshalb werden in COMSOL Multiphysics die Startpunkte der Strömungslinien auf einer Höhe $z = 280 \mu\text{m}$ knapp unter dem Glasdeckel gewählt. Diese simulierten Strömungslinien befinden sich dann in derselben Region, die vom Fokusbereich des Mikroskops erfasst wird. Das Simulationsbild enthält neben den simulierten Strömungslinien auch die weißen Grenzlinien des in COMSOL Multiphysics importierten Modells (vgl. Abb. 4.19A). Die äußeren Linien erlauben die Ausrichtung des simulierten Strömungsprofils am Experiment. Die Linien im Innenbereich zeigen nicht durchwegs die Grenze des Meniskus an (im Gegensatz zu den simulierten Volumenkraftfeldern, in denen der Meniskus erkennbar ist).

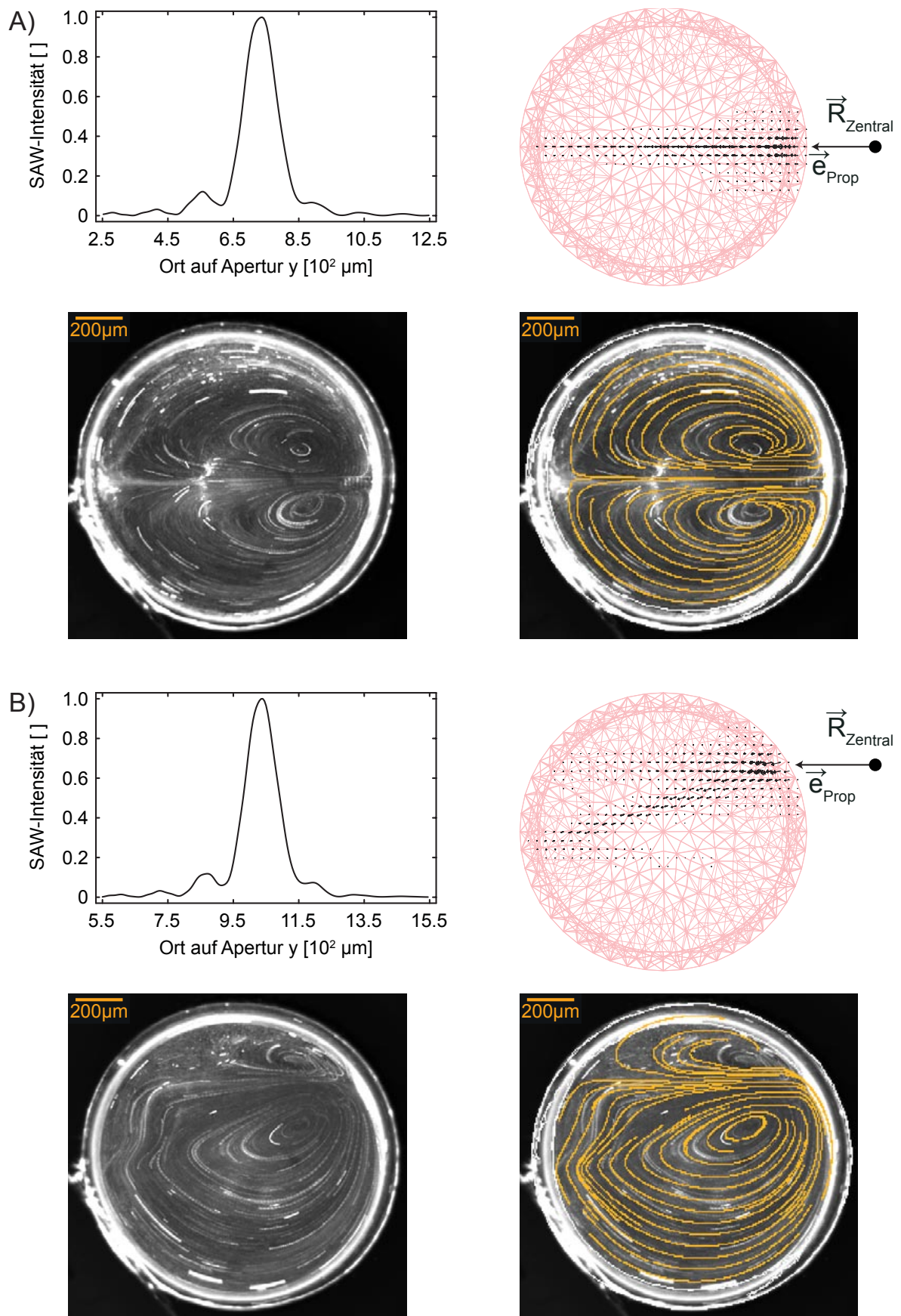


Abbildung 4.22 Übersicht des Schallpfad-Profiles, des Volumenkraftfelds in Draufsicht, des experimentellen Strömungsprofils und der Überlagerung mit dem simulierten Strömungsprofil: Konfiguration (A) und (B) aus Tab. 4.1.

In Abb. 4.22A trifft die SAW fast zentral auf den Katenoid. Entsprechend erhält man eine relativ symmetrische Verteilung der Kraftvektoren um die Symmetrieebene. Die Strömung und die Wirbelpositionen der Simulation entsprechen gut den experimentellen Strömungslinien. Sobald der Schallpfad nicht mehr in der Symmetrieebene des Katenoids einfällt, treten die Vorzüge des Raytracing-Ansatzes zutage. In Abb. 4.22B erkennt man, dass durch die Ablenkung der direkt unter dem Meniskus startenden Strahlen am Meniskus ein Bereich ausgeprägter Volumenkraft erzeugt wird, der von der Propagationsrichtung \vec{e}_{prop} der SAW abweicht. Die Strahlen, die nicht unterhalb des Meniskus starten, sind als schwächerer Anteil erkennbar, der sich entlang \vec{e}_{prop} bis zum Ende des Katenoids ausbildet, wo in beiden Fällen Reflexion stattfindet. Dieses komplexe Volumenkraftfeld ist in der Lage, sowohl die Aufweitung der experimentellen Strömung im Bereich hinter den Wirbeln als auch die Reflexion am Ende des Katenoids zu erklären. Der untere Wirbel kann dabei sehr gut reproduziert werden. Der obere Wirbel ist im Experiment nur vage auszumachen, die beobachteten Partikeltrajektorien stimmen aber ebenfalls gut mit der Simulation überein. Positioniert man den Schallpfad so, dass die SAW den Katenoid am Außenrand streift, so ist der Einfluss des Meniskus am größten. In Abb. 4.23C zeigt das Volumenkraftfeld, dass der Großteil der Strahlen vom Meniskus abgelenkt wird und damit der am Ende des Katenoids reflektierte Anteil geringer ausfällt. Im Vergleich zum Experiment erreichen die Simulationen z.B. im Bezug auf die Wirbelposition oder den Verlauf der Strömung im oberen Bereich des Katenoids nicht ganz die Präzision der Fälle **(B)** und **(C)**. Dies ist allerdings auf Diskrepanzen zwischen dem in der Simulation idealisierten Meniskus und dem realen Verlauf von Kontaktlinie und Meniskus in diesem Bereich zurückzuführen. Befüllt man das Reservoir erneut, so lassen sich die Simulationen für die interessanten Fälle **(B)** und **(C)** in **(D)** und **(E)** wiederholen. In Abb. 4.23D führt dies zu einer erheblich besseren Übereinstimmung der Simulation mit dem Experiment. Auch in Abb. 4.23E erhält man die gewohnte Übereinstimmung.

Der Raytracing-Ansatz ist also geeignet, die komplexen Strömungsprofile zu erklären, die beim Betrieb eines Katenoid-förmigen Wasserreservoirs auftreten. Hierbei werden sowohl Wirbelpositionen als auch Strömungslinien präzise simuliert. Abweichungen ergeben sich dabei hauptsächlich durch geometrische Unterschiede zwischen Experiment und dem Raytracing-Modell, bzw. dem FEM-Modell. Diese können insbesondere durch fehlerhafte Angaben zum Flüssigkeitsvolumen (Pipettierungenauigkeit, Abdampfung von Flüssigkeit), der Höhe des Katenoids oder Abweichung von der idealen Benetzung entstehen. Im nächsten Abschnitt wird der Anteil freier Oberflächen deutlich erhöht, indem der Raytracing-Ansatz in einem freien Tropfen getestet wird.

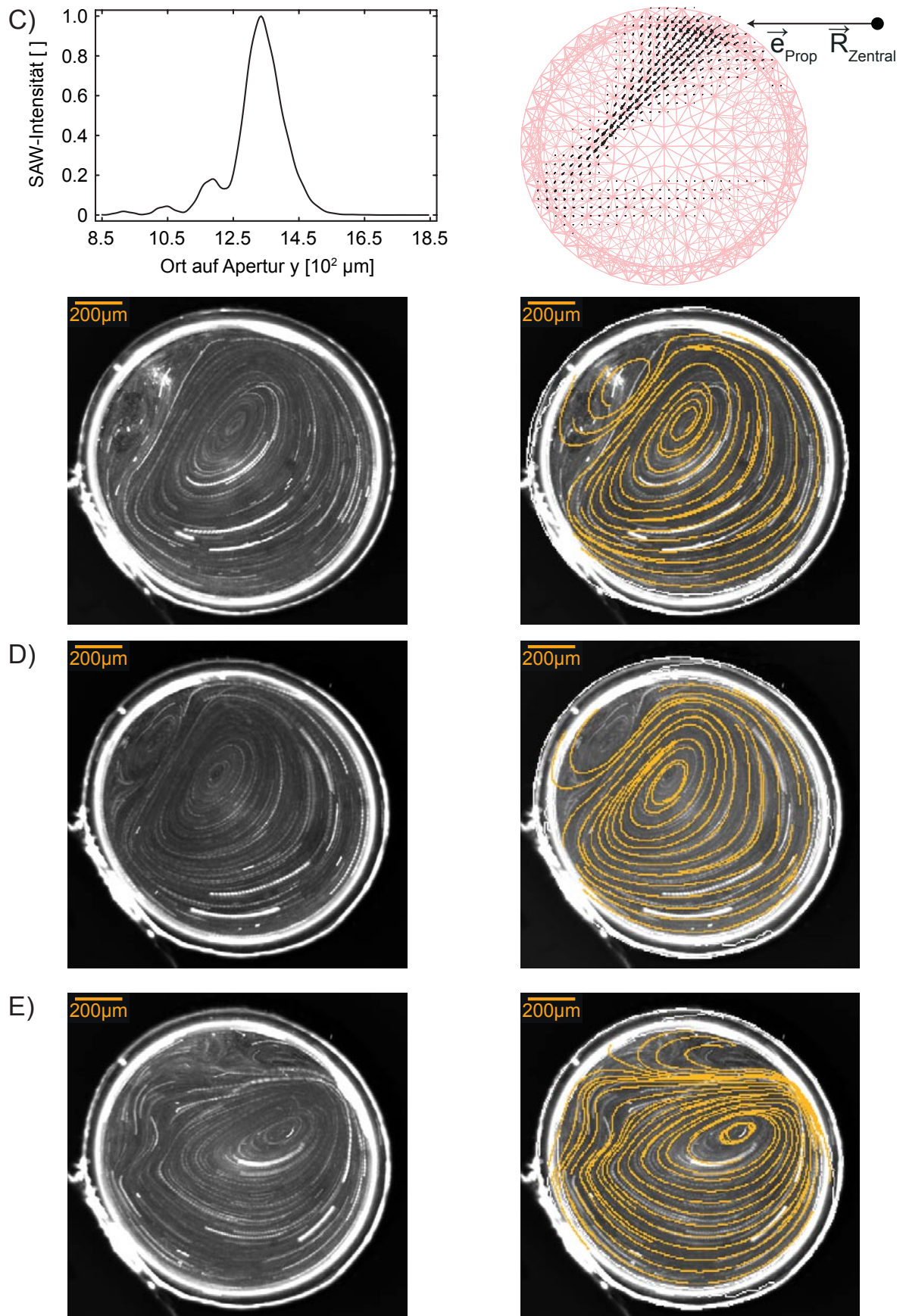


Abbildung 4.23 Übersicht des Schallpfad-Profiles, des Volumenkraftfelds in Draufsicht, des experimentellen Strömungsprofils und der Überlagerung mit dem simulierten Strömungsprofil: Konfiguration (C), (D) und (E) aus Tab. 4.1.

4.5.2 Freier Tropfen

Das einfache System eines freien Tropfens kann auf dem Chip aus Kapitel 4.5.1 untersucht werden. Dazu wird, wie in der 3d-Ansicht Abb. 4.24D dargestellt, der Quartz-Glasdeckel entfernt und ein Tropfen auf die hydrophile Fläche pipettiert.

An dieser Stelle werden die drei Konfigurationen **(A)**-(**C**) aus Tab. 4.1 am freien Tropfen verifiziert, sodass sich für die Simulation, abgesehen vom Raytracing-Modell, keine Änderungen in den Parametern ergeben. Das auf die hydrophile Fläche pipettierte Volumen zur Berechnung der Geometrie im Surface Evolver beträgt $V_{H_2O} = 0.42 \mu\text{l}$. Die Strömungslinienbilder werden erneut mit Startpunkten direkt unter der Grenzfläche Wasser-Luft berechnet und mit den experimentellen Bildern von Daniel Gogel überlagert.

Vergleicht man Experiment und Simulation in Abb. 4.24A-C, so fällt auf, dass die grundlegenden Eigenschaften der Strömung jeweils simuliert werden. Der gekrümmte Strömungsbereich zwischen den beiden Wirbeln wird entsprechend wiedergegeben. Im Gegensatz zu den Katenoid-Simulationen ist die Benetzung des Substrats erheblich einfacher gestaltet und so ergeben sich bei keinem Experiment besonders ausgeprägte Abweichungen. Jedoch kann in allen drei Fällen die Wirbelposition nur ungefähr reproduziert werden. Dies lässt sich auf einen zusätzlichen Effekt zurückführen, der nur bei gekrümmten freien Oberflächen auftritt und den Vergleich Experiment-Simulation anhand von Bildern durch Auflichtmikroskopie erschwert. An der Grenzfläche Wasser-Luft kommt es zur Brechung des Emissionslichts der Beads (Abb. 4.24E). Dieser Effekt ist nicht vernachlässigbar (vgl. [Strobl01] S67, [Strobl05] S46 und fluidische Mikrolinsen nach [Krupenkin03]), da der Krümmungsradius des verwendeten Tropfens nur $\approx 690 \mu\text{m}$ ist. Dadurch ergibt sich eine Unsicherheit für die Position des Teilchens und den Koordinatenbereich der Strömungslinien-Simulation, der von der Fokusebene des Mikroskops abhängt. Es ist i.a. nicht zu erwarten, dass die Draufsicht der Simulation der Draufsicht des Experiments mit Brechungseffekten entspricht. Dieser Effekt kann so nicht kompensiert werden, da zur Berechnung u.a. der Strahlengang im Objektiv des Mikroskops bekannt sein muss. Dieser ist dem Anwender aber nicht zugänglich.

Im Rahmen dieser Unsicherheiten werden die simulierten Strömungsmuster durch die Experimente am freien Tropfen bestätigt. Für eine genauere Verifizierung wird im Ausblick 7.1 ein Messkonzept vorgestellt, um die Brechungsphänomene experimentell zu umgehen. Im nächsten Abschnitt wird nun die häufig verwendete Geometrie einer geschlossenen Wasserbahn mit Kurven simuliert.

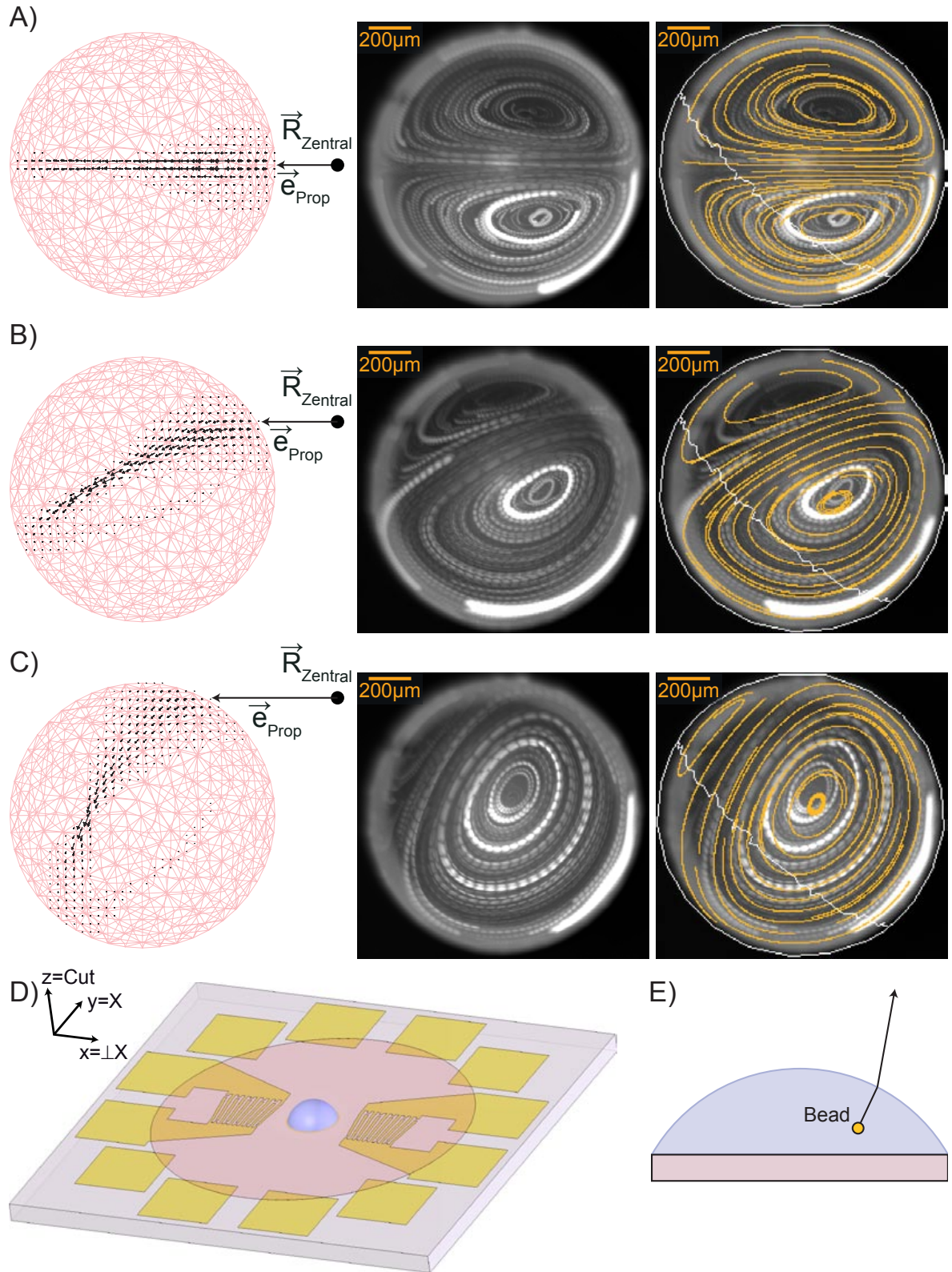


Abbildung 4.24 Übersicht des Volumenkraftfelds in Draufsicht, des experimentellen Strömungsprofils und der Überlagerung mit dem simulierten Strömungsprofil im freien Tropfen: **(A)-(C)** analog zu Tab. 4.1. **(D)** Der Chip in 3d-Ansicht mit pipettiertem Tropfen (Probenfoto im Anhang Abb. B.5B). **(E)** An der Grenzfläche Wasser-Luft kommt es zur Brechung des von Beads emittierten Lichts.

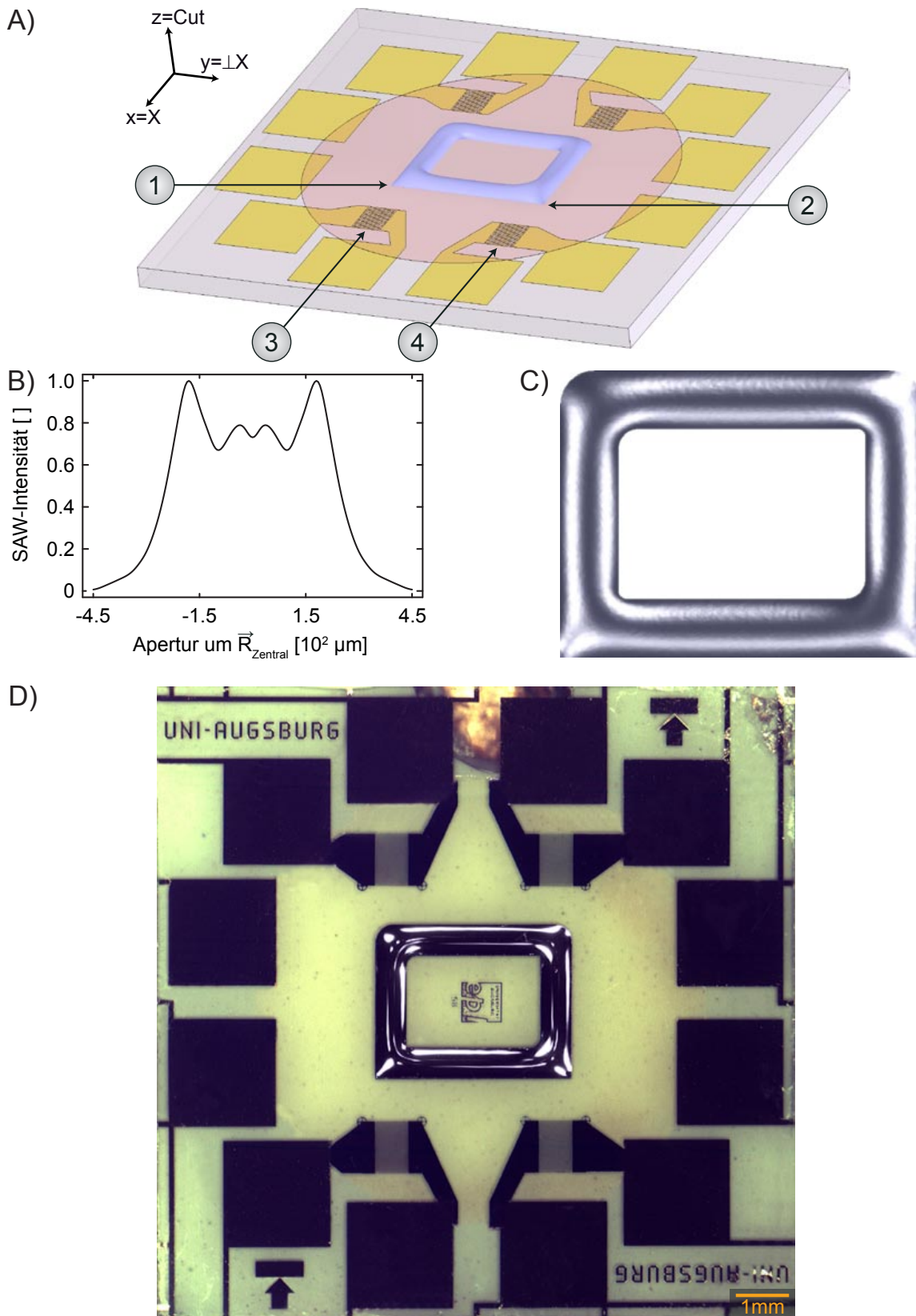


Abbildung 4.25 (A) Der Chip in 3d-Ansicht mit befüllter Fluidik-Bahn. Das Wasser wird in den beiden rechtwinkligen Kurven (1) und (2) mit den IDTs (3) und (4) angetrieben. (B) Schallpfad-Profil der SAW-Intensität für die eingesetzten IDTs. (C) Die dargestellte Fluidik-Bahn wurde mit dem Surface Evolver entwickelt. (D) Qualitativ stimmt diese gut mit dem befüllten Chip im Experiment überein.

4.5.3 Kurven mit freien Oberflächen

In Kapitel 4.4.4 wurde bereits ein Beispielmmodell einer Fluidik-Bahn mit rechtwinkligen Kurven simuliert. Die Kurven eignen sich besonders zur Einkopplung der SAW, da der weitere Verlauf der Fluidik-Bahn in Ausbreitungsrichtung der SAW gelegt werden kann. So wird durch einen IDT in der Kurve im Rest der Fluidik-Bahn eine kontinuierliche Strömung entlang der Bahn realisiert. Hier erfolgt für derartige rechtwinklige Kurven ein Vergleich zwischen Simulation und Experiment.

Der Chip in Abb. 4.25A besitzt zwei Kurven **(1)** und **(2)**, deren Außenrand rechtwinklig abknickt. Der Innenrand von Kurve **(1)** ist ebenfalls rechtwinklig, bei Kurve **(2)** ist die Innenseite auf einen Radius von ca. $200\text{ }\mu\text{m}$ abgerundet. Mit den IDTs **(3)** und **(4)** (Konfiguration IDT1 in Tab. B.2) kann die SAW in die jeweilige Kurve eingekoppelt werden um das Wasser anzutreiben. Dabei erzeugen die IDTs eine breite SAW-Front, wie das Schallpfad-Profil in Abb. 4.25B bestätigt. Die Fluidik-Bahn wird für die Experimente mit $V_{H_2O} \approx 0.8\text{ }\mu\text{l}$ Wasser und ($r_P = 2.3\text{ }\mu\text{m}$)-Beads befüllt (vgl. Abb. 4.25C und D). Die geringe Wassermenge fördert zwar die Ungenauigkeiten des pipettierten Flüssigkeitsvolumens, verringert aber gleichzeitig die Linseneffekte. Die Kühltemperatur des Probensockels wird auf $T = 10^\circ\text{C}$ geregelt, wodurch sich mit der Umgebungstemperatur $T = 21^\circ\text{C}$ eine mittlere Temperatur für die Simulation von $T = 15.5^\circ\text{C}$ ergibt. Neben den Standardeinstellungen der letzten Abschnitte ($d_{Ray} = d_{Quell} = 2\text{ }\mu\text{m}$, Gitterabmessungen $\approx 15\text{ }\mu\text{m}$, Schwellwert 0.02) werden die IDTs hier in „128° rot X“-Richtung bei $f = 163\text{ MHz}$ eingesetzt. Dadurch verringert sich vor allem die 1/e-Abklinglänge der Schallintensität im Wasser. Die Zentralpunkte $\vec{R}_{Zentral}$ liegen für Kurve **(1)** bei $(1466, -1560)$ und für Kurve **(2)** bei $(1466, 1560)$. Die Ausbreitungsrichtung \vec{e}_{Prop} der SAW wird jeweils mit $(-1, 0)$ definiert.

Wie bereits in Kapitel 4.4.4 angedeutet, bewirkt die gekrümmte Oberfläche des Wassers in der Kurve eine Ablenkung im Volumenkraftfeld von der Ausbreitungsrichtung \vec{e}_{Prop} der SAW. In den Experimenten entsteht so eine abgelenkte Strömung, die durch die Simulation in Abb. 4.26A gut nachvollzogen wird. Darüber hinaus konnte durch die geringe Befüllung der Linseneffekt soweit reduziert werden, dass auch die Wirbelpositionen übereinstimmen. In Abb. 4.26B ergeben sich Abweichungen in der Position des oberen Wirbels. Bereits in Abb. 4.23C und D wurde ersichtlich, dass Diskrepanzen zwischen der berechneten Geometrie im Surface Evolver und der realen Benetzung des Experiments zu solchen Unterschieden in beobachteten und simulierten Strömungsprofilen führen können. Dies wird gerade durch extreme Benetzungsgeometrien wie der rechtwinkligen Kurve begünstigt.

Darüber hinaus erkennt man in **(5)** und **(6)**, dass die Beads in Einkopplungsbereichen hoher SAW-Intensität zusätzliche Ablenkung erfahren. In Zusammenhang mit der Akkumulation von Teilchen in Wirbeln (Kapitel 6.2) wurde bereits in [Schindler06] vermutet, dass die Simulation der Strömungslinien allein die Bewegung größerer Beads nicht vollständig erklären kann. Vielmehr können diese ausgedehnten Teilchen zusätzliche Kräfte aufgrund des durch Acoustic Streaming aufgebauten statischen Druckfelds

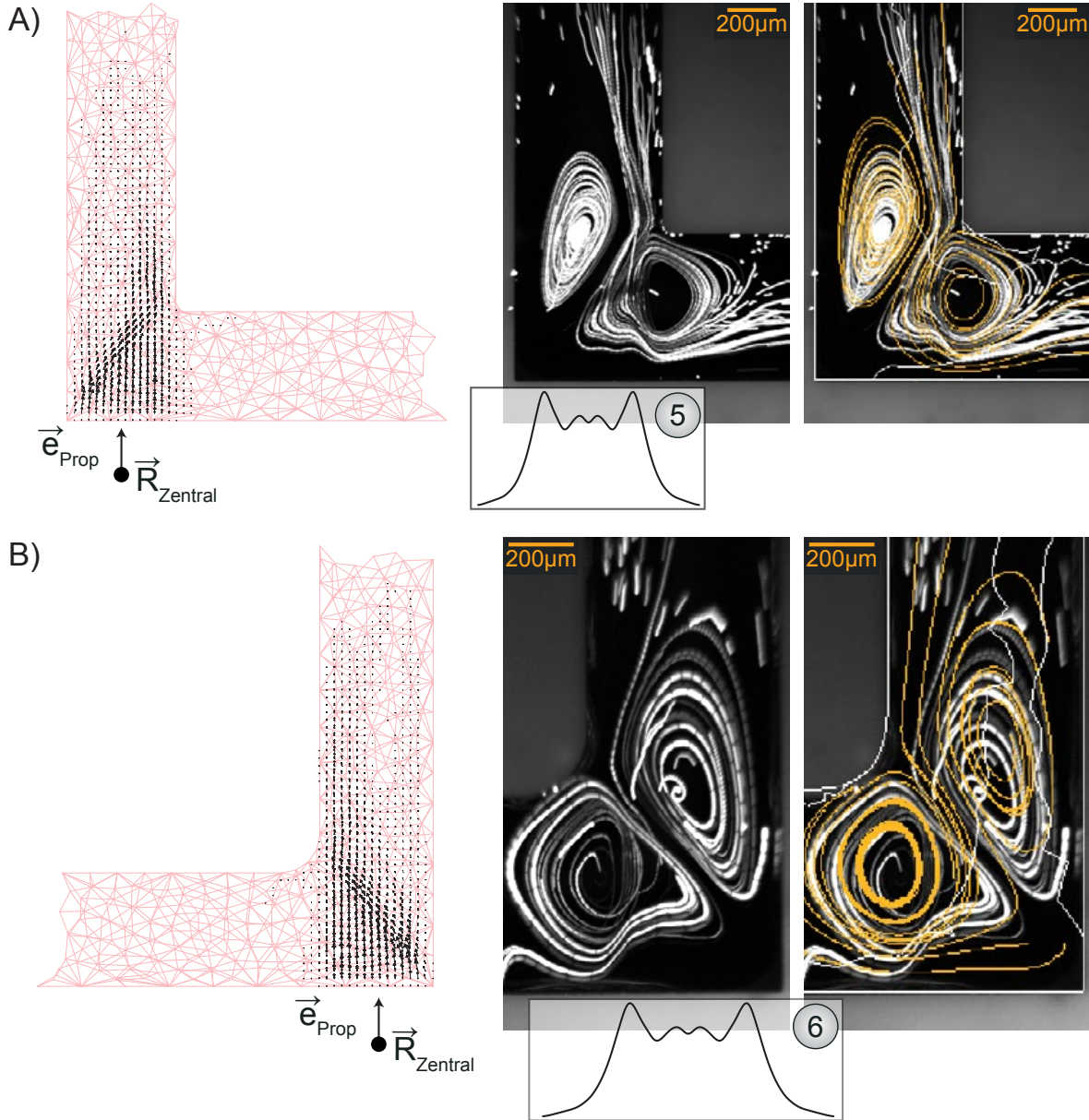


Abbildung 4.26 Übersicht des Volumenkraftfelds in Draufsicht, des Experiments und der Überlagerung mit dem simulierten Strömungsprofil: **(A)** Kurve (1) mit rechtwinkligem inneren Rand, **(B)** Kurve (2) mit abgerundetem inneren Rand. Bei (5) und (6) erfahren die Beads zusätzliche Kräfte aufgrund der einkoppelnden SAW.

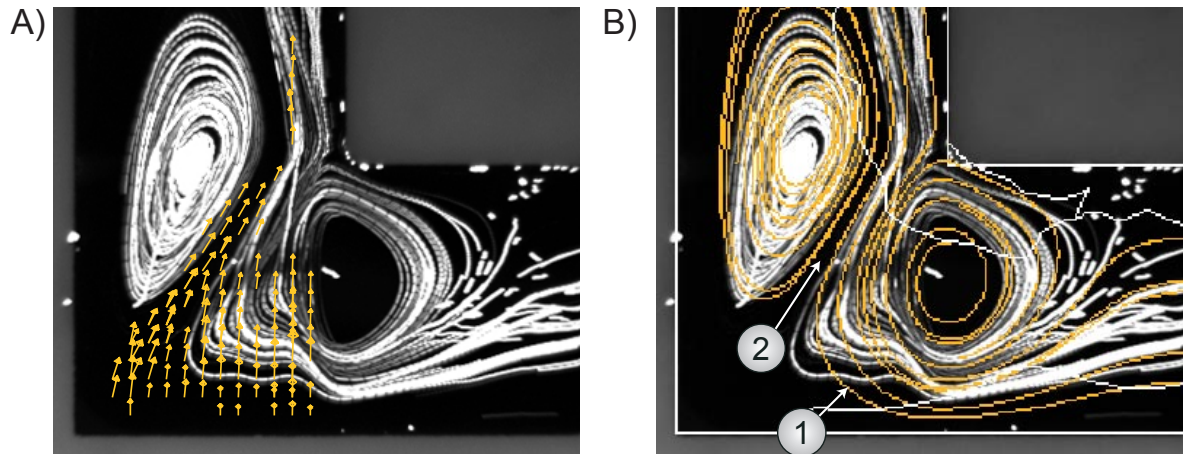


Abbildung 4.27 (A) Beads werden von den Zonen großer Acoustic Streaming-Volumenkraft (überlagerte Pfeile) abgestoßen. (B) In diesen Bereichen (1) und (2) weicht die Simulation der Strömungslinien (entspricht idealisierten Punktteilchen) von den Partikeltrajektorien der Beads ab.

erfahren. Die entsprechenden Korrekturen in Gl. (6.7) beschreiben die Abweichungen im Vergleich zu idealisierten Punktteilchen, die den Strömungslinien folgen. Um diese Vermutungen zu hinterfragen, kann man in Abb. 4.27A die starken Volumenkraftfeldvektoren mit dem experimentellen Bild überlagern. Es zeigt sich, dass die Beads von Bereichen großer Acoustic Streaming-Volumenkraft abgestoßen werden. In diesen Zonen ergeben sich in der Simulation Abb. 4.27B demgemäß die größten Abweichungen. Im Prinzip könnten in COMSOL Multiphysics die Trajektorien ausgedehnter Teilchen nach Gl. (6.7) simuliert werden. Allerdings ist die Form und Größe des stationären Acoustic Streaming-Druckfelds bislang nicht bekannt und deshalb die Berechnung der Partikel-Trajektorien nicht möglich.

4.6 Zusammenfassung

In diesem Kapitel zeigten wir, dass die FEM-Simulation des Strömungseffekts Acoustic Streaming, der durch SAW-induzierte Schallwellen im Wasser verursacht wird, für relevante 3d-Geometrien nicht mehr im Rahmen der Lösung der kompressiblen Navier-Stokes-Gleichung möglich ist. Die feine Diskretisierung des gesamten Volumens, die für die Berechnung der Akustik notwendig ist, übersteigt die Speicherkapazität heutiger Rechner um etwa zwei Größenordnungen und erfordert letztlich unrealistische Rechenzeiten.

Deshalb stellten wir einen neuartigen Ansatz zur Simulation des Acoustic Streaming in 3d-Geometrien durch Raytracing vor. Der zentrale Schritt ist die Zerlegung der Wellenfronten im Wasser in Strahlen und Betrachtung der Strahlpropagation (Raytracing), wodurch die speicherintensive Simulation der Akustik umgangen wird. Die Acoustic Streaming-Volumenkraft wird modelliert, indem der Strahl bei der Propagation im Wasservolumen lokal eine Kraft erzeugt, die proportional zur Schallintensität ist. Dadurch wird der Antriebsmechanismus des Acoustic Streaming beschrieben und statio-

näre Simulationen ermöglicht, welche die rechenintensiven zeitabhängigen Simulationen der Akustik mit anschließender Zeitmittelung ersetzen. Um dieses Kernelement wurden die Bestimmung der Flüssigkeitsgrenzflächen mit dem Surface Evolver, die Berechnung der SAW-Intensität auf dem Substrat mit der ASoW-Methode nach [Visintini90] und die Simulation der Fluidik des Acoustic Streaming-Volumenkraftfelds mit der Stokes-Gleichung konstruiert. Damit sind wir erstmals in der Lage eine vollständige Simulation von der Anregung der SAW durch den IDT bis zu den Strömungsprofilen der SAW-Fluidik zu vollziehen. Der Aufwand für diese umfassende Behandlung bleibt dabei im zeitlichen Rahmen einer 2d-Simulation der kompressiblen Navier-Stokes-Gleichung [Köster06A] (< 2 h) und bedarf der Speichieranforderungen gängiger Heimrechner (< 2 GB). Die Proportionalität zwischen der Acoustic Streaming-Volumenkraft und der Schallintensität im Wasser konnte dabei genauso experimentell abgeleitet werden, wie die $1/e$ -Abklinglänge der SAW-Intensität auf dem Substrat. Die $1/e$ -Abklinglänge der Schallintensität im Wasser wurde der Literatur entnommen [Coates89].

Der Informationsbedarf zur Simulation beschränkt sich auf experimentelle Parameter wie SAW-Frequenz, IDT-Design, Entfernung zwischen IDT und Flüssigkeit, benetzte Flächen, Wasservolumen und Wassertemperatur. Bei der Lösung der Stokes-Gleichung verbleibt die Proportionalitätskonstante f_0 als einziger freier Parameter zur Einstellung der Geschwindigkeit im Fluid-Reservoir. Damit steht ein Lösungskonzept mit kleinem Parametersatz zur effizienten Simulation der SAW-Fluidik in beliebigen 3d-Geometrien zur Verfügung, deren Qualität anhand dreier Systeme verifiziert wurde.

Drei Effekte können dabei zu Abweichungen der simulierten Strömungsprofile von experimentellen Bead-Trajektorien führen:

1. Ungenauigkeit der Volumen- und Benetzungsangaben der Flüssigkeit
2. Linseneffekt bei gekrümmten freien Oberflächen
3. Zusätzliche Kräfte des Acoustic Streaming auf ausgedehnte Teilchen in der Einkopplungsregion der SAW

Die experimentellen Strömungslinien und Wirbelpositionen konnten für ein Katenoidförmiges Fluid-Reservoir, das durch einen Quartz-Glasdeckel bedeckt ist, präzise im Rahmen der Parameterungenauigkeiten (1.) simuliert werden. Im freien Tropfen wurde die Struktur der Strömung sehr gut wiedergegeben, allerdings ergibt sich aufgrund der optischen Brechungseffekte (2.) an den gekrümmten Grenzflächen ein Diskrepanz zwischen Experiment und Simulation. Die Strömung in Kurven wurde ebenfalls sehr gut verstanden und gestattete außerdem aufgrund des Designs, zusätzliche Kräfte auf Beads (3.) in der Einkopplungsregion der SAW zu beobachten. Diesen nehmen in Kapitel 6.2 eine Schlüsselrolle ein.

Kapitel 5

Mischen mit chaotischer Advektion

Als typische Anwendungsgebiete für Lab-on-a-chip Technologien werden z.B. Mikroreaktoren oder Microarrays vorgeschlagen [Ducrée04]. In der chemischen Forschung erlauben Mikroreaktoren definierte Reaktionsbedingungen bei geringem Totvolumen und eignen sich hervorragend als Entwicklungssysteme für Industrieprozesse. Ein Microarray besteht aus einem Punktraster verschiedener DNA-Einzelstränge, die als molekulare Sonden dienen. Eine aufgebrachte Lösung wird analysiert, indem ihre DNA-Einzelstränge spezifisch an die Sonden binden (*Hybridisierung*). In beiden Anwendungen sind geringe Flüssigkeitsvolumina im Einsatz und die Durchmischung erfolgt meist diffusiv auf Zeitskalen von Stunden. Darunter leidet nicht nur die Reproduzierbarkeit von chemischen Prozessen, sondern auch die Verlässlichkeit der Microarray-Diagnostik. An diesen Beispielen wird bereits der Bedarf an Mischtechniken deutlich.

Dieses Kapitel zeigt die physikalischen Grundlagen und gibt einen Überblick über konventionelle Mischtechniken. Daraufhin wird in Theorie und Experiment erläutert, wie mit dem Effekt der chaotischen Advektion bisher kaum mischbare Systeme mit beliebiger Geometrie effizient gemischt werden können.

5.1 Theoretische Grundlagen

5.1.1 Mischen bei kleinen Reynolds-Zahlen

In Kapitel 4.1.3 wurde bereits erörtert, dass in der Mikrofluidik die Reynolds-Zahl gewöhnlich kleiner 1 ist. Dies spiegelt den dominierenden viskosen Term der Navier-Stokes-Gleichung wieder und führt zu einer laminaren Strömung, in der Störungen auf kurzen Distanzen gedämpft werden. Die Turbulenzen, die makroskopische Flüssigkeitsmengen mischen können, sind in der Mikrofluidik i.a. nicht vorhanden und können allenfalls auf kleinen Längenskalen über Fremdpartikel induziert werden [Groissman01].

Andererseits ist die Diffusion allein keine Lösung des Problems. Die Diffusionskonstante D für ein Objekt mit Radius R berechnet man mit der Stokes-Einstein-Gleichung

Diffusionslänge l_D [μm]	Oligonukleotid $R = 3 \text{ nm}$	PCR Produkt $R = 50 \text{ nm}$	Polystirene Bead $R = 0.75 \mu\text{m}$	Zelle $R = 5 \mu\text{m}$
0.5	$t = 8.7 \cdot 10^{-4} \text{ s}$	$t = 1.5 \cdot 10^{-2} \text{ s}$	$t = 2.2 \cdot 10^{-1} \text{ s}$	$t = 1.5 \text{ s}$
5	$t = 8.7 \cdot 10^{-2} \text{ s}$	$t = 1.5 \text{ s}$	$t = 2.2 \cdot 10^1 \text{ s}$	$t = 1.5 \cdot 10^2 \text{ s}$
50	$t = 8.7 \text{ s}$	$t = 1.5 \cdot 10^2 \text{ s}$	$t = 2.2 \cdot 10^3 \text{ s}$	$t = 1.5 \cdot 10^4 \text{ s}$
750	$t = 2.0 \cdot 10^3 \text{ s}$	$t = 3.3 \cdot 10^4 \text{ s}$	$t = 4.9 \cdot 10^5 \text{ s}$	$t = 3.3 \cdot 10^6 \text{ s}$

Tabelle 5.1 Diffusionszeiten von Partikeln verschiedener Radien R bei $T = 20^\circ \text{ C}$ über unterschiedliche Längen l_D .

[Tabeling05]:

$$D = \frac{kT}{6\pi R \eta} \quad (5.1)$$

Eine anfänglich punktförmig konzentrierte Verteilung wird sich innerhalb der Zeit t durch Diffusion zu einer Gaußverteilung entwickeln. Der Radius l_D einer sich so ausbreitenden Zone lässt sich durch die Standardabweichung approximieren:

$$l_D \approx 2\sqrt{Dt} \quad (5.2)$$

Wertet man dies für Objekte unterschiedlicher Radien R aus, so erkennt man in Tab. 5.1, dass die Zeitskalen ab einer Diffusionslänge von $l_D = 50 \mu\text{m}$ gerade für biologische Objekte mit $R \geq 50 \text{ nm}$ in den Bereich von Stunden und Tagen gelangen. Für $l_D \leq 5 \mu\text{m}$ kann die Diffusion durchaus als effektiver Ansatz verstanden werden. Dies erklärt die Wirkungsweise vieler experimenteller Ansätze zur Reduzierung der Diffusionslänge in Kanalströmungen. Bei der hydrodynamischen Fokussierung [Knight98, Wu05] wird der Wasserstrom durch seitliche Zuleitung einer hydrophoben Flüssigkeit verengt und in dieser Engstelle die beteiligten Substanzen diffusiv gemischt. Weitere Verengung erhöht so die Mischeffizienz, verringert dabei aber den Durchsatz. Ist hingegen die Verengung zu gering, so bedarf es langer Kanäle, um homogene Durchmischung zu erzielen. Bei der Multilaminierung [Hessel03, Hardt03] werden die zu mischenden Flüssigkeiten in möglichst vielen dünnen Schichten aneinander geführt, um die Diffusionslänge zu verkleinern und die Grenzfläche zu vergrößern. Die komplexe Struktur solcher Mischer ist für die industrielle Nutzung eher hinderlich. Für weitere Möglichkeiten zur Mischung von Kanalgeometrien sei an den Übersichtsartikel [Nguyen04] verwiesen.

Konzepte für die Mischung beliebiger Geometrien können nicht allein auf Diffusion basieren, denn dort kann nicht ohne weiteres die Diffusionslänge verringert werden. Beispielsweise können die lateralen Abmessungen eines Microarrays aufgrund der Ausdehnungen des Punktrasters nicht beliebig verkleinert werden. In diesen Geometrien tritt der nicht-diffusive Transport wieder in den Vordergrund.

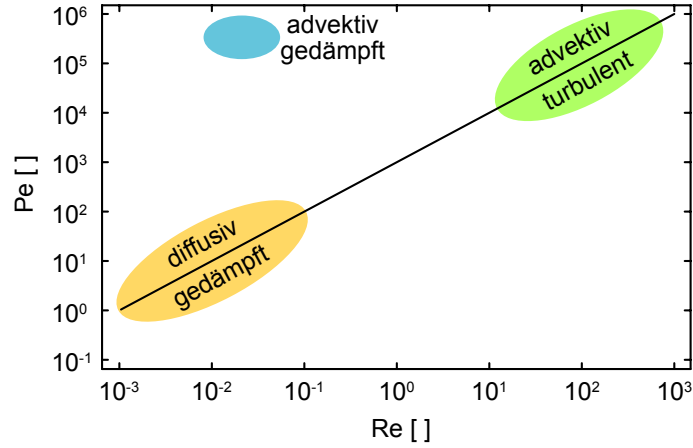


Abbildung 5.1 Mikrofluidik-Systeme befinden sich um eine Gerade $Pe = 1000 Re$. Systeme bei kleiner Reynolds-Zahl werden dabei diffusiv, Systeme bei hoher Reynolds-Zahl advektiv und durch Turbulenzen gemischt. Der Bereich mit kleiner Reynolds-Zahl und hoher Péclet-Zahl ist nicht erforscht (nach [Nguyen04]). Dort sind Turbulenzen und Diffusion untergeordnete Effekte und eine Mischung erfolgt rein advektiv.

5.1.2 Die Péclet-Zahl

Um den Einfluss der Diffusion in einem System abschätzen zu können, benötigt man die Zeitskala t_{adv} des gerichteten Transports durch Strömung (Advektion) und die Zeitskala der Diffusion t_{diff} bei typischen Längen l_0 und Geschwindigkeiten u_0 des Systems:

$$t_{adv} = \frac{l_0}{u_0} \quad (5.3)$$

$$t_{diff} = \frac{l_0^2}{D} \quad (5.4)$$

Das Verhältnis dieser Zeitskalen wird als Péclet-Zahl Pe bezeichnet [Tabeling05]:

$$Pe = \frac{t_{diff}}{t_{adv}} = \frac{u_0 l_0}{D} \quad (5.5)$$

Nach [Nguyen04] finden sich praktisch alle untersuchten Mikrofluidik-Systeme entlang einer Geraden $Pe = 1000 Re$ im $Pe-Re$ -Diagramm in Abb. 5.1. Im Bereich kleiner Reynolds-Zahlen erfolgt die Mischung diffusiv, bei hohen Reynolds-Zahlen advektiv und durch Verwendung von Turbulenzen. Der Bereich großer Péclet-Zahl und kleiner Reynolds-Zahl ist jedoch unerforscht [Nguyen04]. In diesem Fall übersteigen Diffusionszeiten die Advektionszeiten bei weitem, weshalb die Diffusion vernachlässigbar ist. Zusätzlich treten keine Turbulenzen in der überdämpften Strömung auf, die zur Mischung herangezogen werden könnten.

Um die Leistungsfähigkeit der chaotischen Advektion zu demonstrieren, werden wir in dieser Arbeit ein System dieses Parameterbereichs advektiv mischen, ohne auf Diffusion und Turbulenzen angewiesen zu sein.

5.1.3 Chaotische Advektion

Zur Verifizierung der Mischungseigenschaften eines Systems kommen experimentell Beads zum Einsatz, deren Bewegung im Fluid verfolgt werden kann. Wenn in Systemen der Diffusion und Turbulenzen nur untergeordnete Rollen zukommen, muss die Advektion der in der Flüssigkeit zu mischenden Beads selbst chaotisch sein. In der Literatur lässt sich praktisch keine übereinstimmende Definition von Chaos finden [Wiggins04], weshalb hier die gängigsten Eigenschaften dargelegt werden sollen.

Der Begriff „Chaos“ selbst beschreibt keinen Zustand, sondern die Dynamik eines nicht-linearen Systems. Man spricht von deterministischer Dynamik eines Systems, wenn der Folgezustand vom aktuellen Zustand durch Gleichungen eindeutig abhängt [Vogel97]. So wird auch der 2d-Transport eines Beads beschrieben durch:

$$\dot{R}_x(t) = u_x(\vec{R}, t) \quad (5.6)$$

$$\dot{R}_y(t) = u_y(\vec{R}, t) \quad (5.7)$$

Hierbei ist \vec{R} die Position des Teilchens und \vec{u} das Geschwindigkeitsfeld des Fluids. Die diskretisierte Trajektorie (*Orbit*) eines Teilchens wird dann durch eine Menge von Punkten $\vec{R}^{(0)}, \dots, \vec{R}^{(N)}$ beschrieben, deren Verlauf vom Startpunkt $\vec{R}^{(0)}$ abhängt. Wenn die Anzahl N der Punkte endlich ist, spricht man von einem periodischen Orbit. Man unterscheidet dabei elliptische Orbits (benachbarte Orbits bleiben immer in der Nähe) und hyperbolische Orbits (umgebende Orbits entfernen oder nähern sich, streben aber letztendlich vom periodischen Orbit weg). Diese Stabilität eines Orbits wird in linearer Näherung durch den Lyapunov-Exponent L angezeigt. Elliptische Orbits sind durch $L = 0$ gekennzeichnet, hyperbolische Orbits zeigen $L > 0$ und $L < 0$. Die Summe aller L eines Orbits ergibt in inkompressiblen Strömungen immer Null. Das bedeutet wiederum, dass die Umgebung von elliptischen Orbits praktisch unverändert bleibt, was für die Mischung denkbar ungünstig ist. Die Umgebung hyperbolischer Orbits verändert hingegen ihre Form, sie wird gestreckt und gestaucht. Die erste Bedingung für chaotische Advektion ist also die Existenz von Orbits, welche positive Lyapunov-Exponenten tragen. Dies allein ist allerdings nicht ausreichend. Eine weitere starke Eigenschaft ist Ergodizität. Ein System nennt man dann ergodisch, wenn die Trajektorie jedem Punkt des Zustandsraums, der mit den äußeren Zwängen vereinbar ist, in endlicher Zeit beliebig nahe kommt. Systeme, die ergodisch sind und über Orbits mit positiven Lyapunov-Exponenten verfügen, zeigen chaotisches Verhalten [Wiggins04].

Das Ziel des Mischens ist, die Grenzfläche zwischen zwei anfänglich getrennten Substanzen zu maximieren. Zusätzlich soll dies in kürzester Zeit oder mit minimalem Energieaufwand geschehen. Im Experiment werden dazu Strömungsprofile implementiert, welche die Flüssigkeitsvolumina strecken und falten. Dadurch wird die Oberfläche für Diffusion vergrößert und die Konzentrationsgradienten in den entstehenden Flüssigkeitsstreifen erhöht. Strecken und Falten kann somit grob mit chaotischer Mischung gleichgesetzt werden [Ottino04B]. Gleichbleibende Strömungen führen i.a. zu sehr begrenzter Streckung und Faltung. Stattdessen bedarf es einer zeitlichen Variation der

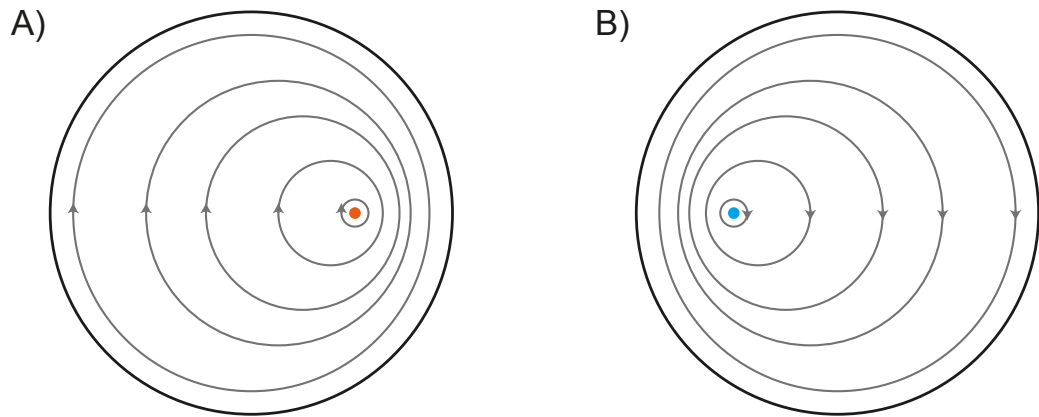


Abbildung 5.2 Chaotische Advektion wird in einem kreisförmigen 2d-Gebiet nach [Aref84] durch Umschalten zwischen zwei räumlich getrennten Wirbeln erzielt, die in **(A)** und **(B)** als Punkte dargestellt sind. Dabei bewirkt die räumliche Trennung die erforderliche Kreuzung der grauen Strömungslinien.

Strömung, sodass sich die Strömungslinien zu zwei unterschiedlichen Zeitpunkten signifikant kreuzen.

In [Ottino04B] werden dazu zeitlich variierende Ränder oder Randeigenschaften vorgeschlagen, was experimentell erfolgreich durch Modifizierung der Wandstruktur entlang der Strömung in Kanälen verwirklicht wurde [Stroock02]. Jedoch sind beispielsweise in Mikroreaktoren oder Mikroarrays die Wände weit voneinander entfernt und somit kaum Einflussmöglichkeiten auf die Strömung im gesamten Fluidvolumen vorhanden. Darüber hinaus erscheint in solchen begrenzten Geometrien die zeitliche Variation der Wandeigenschaften nicht realisierbar. Für beliebige Geometrien ist die ursprüngliche Idee von Aref [Aref84, Meleshko96, Aref00] der blinkenden Wirbel (*blinking vortex*) erheblich vielversprechender. Hierbei beruht die chaotische Advektion auf dem gezielten Ein-/Ausschalten räumlicher getrennter Wirbel (siehe Abb. 5.2), die sich durch Kreuzung der Strömungslinien auszeichnen.

Im nächsten Abschnitt wird nun ein experimenteller Aufbau vorgestellt, der zeitlich modulierte Strömungsprofile mit Wirbeln gezielt einsetzen kann, um chaotische Advektion in der Flüssigkeit zu bewirken.

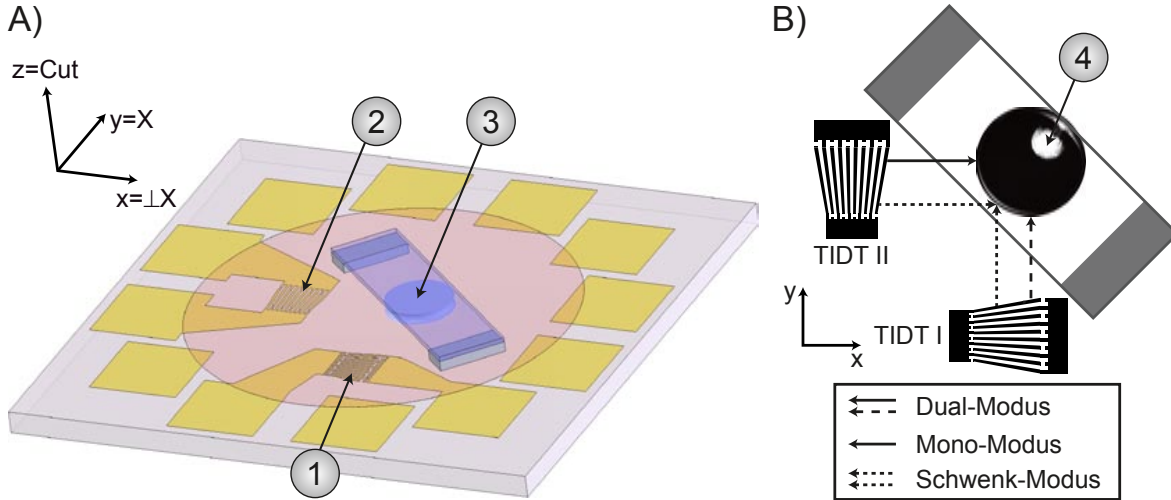


Abbildung 5.3 (A) Mit TIDT I (1) und TIDT II (2) kann der Wasser-Katenoid (3) auf verschiedenste Weisen gemischt werden (Probenfoto im Anhang Abb. B.5C). (B) Die eingepipettierten Beads (4) werden in drei Modi gemischt, für die jeweils an den angezeichneten Positionen SAWs erzeugt werden.

5.2 Realisierung der chaotischen Advektion

5.2.1 Aufbau und Steuerung des Mischer-Chips

In Kapitel 4.5 wurde bereits gezeigt, dass die SAW-Fluidik Wirbel erzeugen kann. In diesem Abschnitt wird ein Chip-Design vorgestellt, auf dem verschiedenste Mischungstechniken mit dem Ziel der chaotischen Advektion im Wasserreservoir getestet werden können.

In Abb. 5.3A sind auf LiNbO₃ 128° rot Y-Cut TIDT I (1) in X-Richtung des Kristalls und TIDT II (2) in $\perp X$ -Richtung aufgebracht (Konfiguration TIDT2 nach Tab. B.2). Damit lassen sich SAWs in die orthogonalen Richtungen $x = \perp X$ und $y = X$ anregen. Das Fluid-Reservoir (3) wird durch eine benetzungsmodulierte $\varnothing 1.5$ mm-Kreisfläche auf der SiO-Schutzschicht definiert und in der Höhe $h = 240 \mu\text{m}$ durch einen Quartz-Glasdeckel begrenzt. Dazwischen wird etwa $0.35 \mu\text{l}$ Wasser und eine geringe Menge an ($r_P = 0.75 \mu\text{m}$)-Beads (4) mit einer $0.5 \mu\text{l}$ Hamilton-Spritze pipettiert. Der kreisförmige Boden des Fluid-Reservoirs ist unter der SiO-Schutzschicht metallisiert und minimiert so eindringendes Streulicht der Wärmeleitpaste. Damit wird der Kontrast nochmals verbessert (vgl. Anhang A.8).

Dieses System widerstrebt der Mischung durch mehrere Eigenschaften. Die Diffusionskonstante der Beads D_{Bead} beträgt nach Gl. (5.1) $D_{\text{Bead}} = 2.8 \cdot 10^{-13} \text{ m}^2/\text{s}$. Die weiten lateralen Ausdehnungen des Fluid-Reservoirs bewirken so diffusive Mischzeiten von $\approx 5 \cdot 10^5 \text{ s}$. Während der längsten Experimente ($t \approx 400 \text{ s}$) erfahren die Beads so gerade eine diffusive Migration von $21 \mu\text{m}$, weshalb die Diffusion gegenüber dem advektiven Transport vernachlässigbar ist. Dies wird repräsentiert durch die hohe Péclet-Zahl $Pe > 4 \cdot 10^5$. Gleichzeitig treten keine Turbulenzen aufgrund der kleinen Reynolds-Zahl $Re < 0.07$ auf. Man befindet sich deshalb in dem in Kapitel 5.1.2 beschriebenen unerforschten Bereich nach [Nguyen04].

Zur Realisierung der chaotischen Advektion ist die SAW-Fluidik mit TIDTs besonders geeignet. Der von TIDTs erzeugte schmale Schallpfad nach Gl. (2.21) kann durch Variation der SAW-Frequenz entlang der Apertur verschoben werden. Somit wird genau gesteuert, an welcher Stelle auf dem Rand des Katenoid-förmigen Fluid-Reservoirs die SAW unter die Flüssigkeit eindringt und zur Acoustic Streaming-Volumenkraft führt. Gleichzeitig führt eine Leistungsmodulation (< 10 Hz) der TIDTs zu einer gleichförmigen zeitlichen Modulation der Acoustic Streaming-Volumenkraft (vgl. Kapitel 4.2.2). Mit dem Superpositionsprinzip der Stokes-Gleichung in der Mikrofluidik können also Acoustic Streaming-Volumenkräfte örtlich und zeitlich superponiert und variiert werden. Im nächsten Abschnitt werden diese Parameter in verschiedenen Konfigurationen eingesetzt, um chaotische Advektion zu erzeugen.

5.2.2 Mischkonfigurationen

Die in dieser Arbeit verwendeten Konfigurationen werden zunächst in zwei Kategorien eingeteilt. Hierzu führen wir den Begriff *Jet* für die Region ein, in der die SAW auf das Fluid-Reservoir trifft und Schallwellen im Wasser anregt. Dort ist die Acoustic Streaming-Volumenkraft und somit die Beschleunigung der Flüssigkeit maximal, wodurch ein Jet als Zone maximaler Transportgeschwindigkeit identifiziert werden kann.

Wir unterscheiden in dieser Arbeit Konfigurationen mit zwei räumlich getrennten Jets (*Dual-Modus*) und Experimente, in denen nur ein Jet (*Mono-Modus*) erzeugt oder zwei Jets an einem Ort (*Schwenk-Modus*) überlagert werden.

Wie in Abb. 5.3B skizziert, treffen im Dual-Modus die SAWs in der Mitte des Fluid-Reservoirs aufeinander. Dadurch entsteht je ein Jet in x - und y -Richtung, welche die pipettierten Beads (4) homogen im Fluid-Reservoir verteilen sollen. Im Experiment wird TIDT II konstant betrieben und die Leistung von TIDT I mit der Frequenz ν moduliert. Ein Ziel der Arbeit ist es, in Experiment und Simulation die optimale Frequenz ν_{opt} abzuleiten, die zur schnellsten Mischung führt.

Als Vergleich wird ein Experiment im Mono-Modus mit einem fixierten Jet durch TIDT II betrieben. Intuitiv und nach [Ottino04B] ist einleuchtend, dass ein solches statisches System mit geringer Streckung und Faltung keine herausragenden Mischeigenschaften bieten sollte. Deshalb wird ein weiteres System vorgestellt, in dem ein Jet durch Superposition zweier SAWs generiert wird. Im Schwenk-Modus werden die Leistungssignale von TIDT I und TIDT II mit derselben Frequenz ν_{Sch} moduliert, aber um 90° phasenverschoben. Dadurch entsteht ein resultierender Jet, der um die Einkopplungsstelle schwenkt.

Zur Umsetzung dieser Konfigurationen werden verschiedene Signaleinstellungen eingesetzt. Im Dual-Modus werden die Beads vom Injektionspunkt hauptsächlich zum Jet in x -Richtung transportiert, der konstant betrieben wird. Sobald der Bead-Strom in die Jet-Region gerät, wird er an den Seiten durch die angrenzenden Wirbel des Jets aufgeweitet. Wenn die Scherraten zu groß werden, weil zwischen dem Jet mit maximaler Fluid-Geschwindigkeit und den Wirbelzentren mit minimaler Fluid-Geschwindigkeit

Konfiguration	SAW-Frequenz	
	TIDT II x -Richtung	TIDT I y -Richtung
Dual-Modus	Frequenzdurchlauf: 139.2 – 142.2 MHz Schrittweite: 1 MHz; Zeitschritt: 10 ms	152 MHz
Mono-Modus	Frequenzdurchlauf: 139.2 – 142.2 MHz Schrittweite: 1 MHz; Zeitschritt: 10 ms	—
Schwenk-Modus	149 MHz	159 MHz

Tabelle 5.2 Übersicht der SAW-Frequenzen für verwendete Mischkonfigurationen.

Konfiguration	TIDT II $P_x(t)$ [dBm]	TIDT I $P_y(t)$ [dBm]
Dual-Modus	$P_x(t) = 2.9$	$P_y(t) = C \cos(2\pi\nu t) + D$ $P_y = -C + D$ für $\nu = 0$ Hz $C = -5.3$ $D = -14.7$
Mono-Modus	$P_x(t) = 2.9$	$P_y(t) = 0$
Schwenk-Modus	$P_x(t) = A \sin(2\pi\nu_{Sch} t) + B$ $C = 4.5$ $D = -6.5$	$P_y(t) = C \cos(2\pi\nu_{Sch} t) + D$ $C = 3.6$ $D = -18.4$
$\nu_{Sch} = 0.125$ Hz		

Tabelle 5.3 Übersicht der Leistungseinstellungen für verwendete Mischkonfigurationen.

Konfiguration	u_{mittel}^{Exp} [$\mu\text{m/s}$]	u_{max}^{Exp} [$\mu\text{m/s}$]
Dual-Modus $\nu = 0$ Hz, $P_y = -C + D$ maximal	204 ± 34	296 ± 49
Dual-Modus $\nu = 0.042$ Hz	212 ± 24	308 ± 34
Dual-Modus $\nu = 0.083$ Hz	207 ± 31	301 ± 45
Dual-Modus $\nu = 0.17$ Hz	207 ± 42	301 ± 61
Dual-Modus $\nu = 0.34$ Hz	213 ± 40	309 ± 58
Dual-Modus $\nu = 0.68$ Hz	206 ± 34	298 ± 49
Mono-Modus	111 ± 8	160 ± 12
Schwenk-Modus (TIDT II)	110 ± 8	158 ± 12
Schwenk-Modus (TIDT I)	102 ± 8	147 ± 12

Tabelle 5.4 Übersicht der mittleren Bead-Geschwindigkeiten u_{mittel}^{Exp} im Jet und daraus berechnete Maximalgeschwindigkeit u_{max}^{Exp} für verwendete Mischkonfigurationen.

der Abstand zu gering ist, erhält man diesen zusätzlichen Mischeffekt, der die Beobachtung der chaotischen Advektion beeinflusst. Deshalb wird der Abstand der Wirbel für konstant betriebene Jets vergrößert. Dies erreicht man durch schnelle Variation der SAW-Frequenz um die zentrale Frequenz, die der eingezeichneten SAW in x -Richtung in Abb. 5.3B entspricht. Ein ganzer Frequenzdurchlauf benötigt dabei gerade 40 ms, wie aus den SAW-Frequenzeinstellungen in Tab. 5.2 hervorgeht. In der Fluidik beobachten wir daher bei unseren geringen Fluid-Geschwindigkeiten keine örtliche Fluktuation des Jets und der benachbarten Wirbel, sondern den zeitgemittelten Effekt eines verbreiterten Jets mit Wirbeln in ausreichendem Abstand. Solche Signale werden mit dem Rhode & Schwarz SML01 produziert, der Frequenzdurchläufe unterstützt. Die restlichen beschriebenen Signale werden mit der Microfluidic-Workstation generiert.

Zur Modulation der Ausgangsleistung der Microfluidic-Workstation werden in der Transducer-Steuerung die in Tab. 5.3 angegebenen Funktionen als Transducer-Programme hinterlegt und für das Experiment mit den jeweiligen Parametern in den C-Control geladen, der diese ausführt (vgl. Kapitel 3.1.4 und 3.1.5). Obwohl die Leistungseinstellungen für später verglichene Experimente gleich gewählt sind und für alle präsentierten Experimente derselbe Chip eingesetzt wurde, ist nicht bewiesen, dass für gegenübergestellte Experimente tatsächlich dieselben Bedingungen herrschen. Beispielsweise kann auf dem Chip kondensierendes Wasser die SAW vor dem Fluid-Reservoir deutlich schwächen und so geringere Fluid-Geschwindigkeiten verursachen.

In unserem Fall jedoch zeigen Messungen der Fluid-Geschwindigkeit durch Particle-Tracking im Jet (nach Kapitel 3.1.7) in Tab. 5.4, dass alle Dual-Modus-Experimente dieselbe mittlere Geschwindigkeit u_{mittel}^{Exp} aufweisen und damit vergleichbare Transportparameter und Voraussetzungen für das Mischen vorliegen. Auch für die Konfigurationen Mono-Modus und Schwenk-Modus, die einen Jet einsetzen, liegen die mittleren Fluid-Geschwindigkeiten u_{mittel}^{Exp} nahe zusammen. Die Maximalgeschwindigkeiten u_{max} werden aus u_{mittel}^{Exp} nach Gl. (5.10) ermittelt und dienen in Kapitel 5.2.3 zum Einstellen der richtigen Maximalgeschwindigkeit der simulierten Geschwindigkeitsfelder. Es wird im übrigen sichtbar, dass die gleichen Leistungseinstellungen für TIDT II im Dual-Modus und Mono-Modus zu unterschiedlichen u_{mittel}^{Exp} führen können. Der Grund hierfür liegt in der Betriebstemperatur der Experimente. Die Experimente im Dual-Modus wurden bei $T = 12^\circ \text{C}$ ausgeführt, die Mono-Modus und Schwenk-Modus Konfigurationen hingegen bei $T = 10^\circ \text{C}$, um während der längeren Betriebszeit die Abdampfung des Wassers zu verringern. So verändern sich die Viskosität des Wassers und die 1/e-Abklinglänge der Schallintensität im Wasser und somit letztlich das Acoustic Streaming und die Fluid-Geschwindigkeit, trotz gleicher SAW-Leistung.

Dieser Abschnitt belegt die jeweilige Vergleichbarkeit der Experimente mit zwei Jets und einem Jet und schafft die Grundlagen zur Angleichung der Geschwindigkeiten der simulierten Geschwindigkeitsfelder des nächsten Abschnitts an die Experimente.

5.2.3 Simulation der Geschwindigkeitsfelder

Die vorgestellten Experimente zur chaotischen Advektion wurden vor der Entwicklung der SAW-Raytracing-Simulation ausgeführt. Als effektiver Kraftansatz zur Simulation der experimentellen Geschwindigkeitsfelder wird deshalb folgendes Vorgängermodell verwendet, das bereits einzelne Elemente des Raytracing-Ansatzes beinhaltet.

Das experimentelle Fluid-Reservoir wird, wie in Abb. 5.4A dargestellt, als Zylinder modelliert, dessen Mantelfläche kreisförmig gewölbt ist. Aufgrund der geringen SAW-Leistungen kommt es nicht zu Verzerrungen der Grenzfläche, wodurch alle Grenzflächen als statisch betrachtet werden können. Die Höhe des Fluid-Reservoirs beträgt $h = 240 \mu\text{m}$ und die Meniskusbreite $b_{Men} \approx 95 \mu\text{m}$. Dies entspricht in guter Näherung den experimentell beobachteten Katenoiden in Abb. 5.4B. Analog zu Kapitel 4.4.4 werden im 3d-Modell in COMSOL Multiphysics die Chip-Oberfläche und der Quartz-Glasdeckel als no-slip- und die Mantelfläche als slip-Grenzfläche charakterisiert. Bei der Simulation der Fluidik im 3d-Modell findet dann die Volumenkraft $\vec{f}^{(i)}$ des durch TIDT (i) bewirkten Acoustic Streaming Anwendung. Das rechtshändige Koordinatensystem der Volumenkraft $\vec{f}^{(i)}$ wird nach Abb. 5.4C durch die Vektoren $\vec{k}^{(i)}$, $\vec{q}^{(i)}$ und \vec{e}_z aufgespannt. Hierbei bezeichnet $\vec{k}^{(i)}$ die Richtung der Volumenkraft, $\vec{q}^{(i)}$ steht senkrecht dazu in der xy -Ebene. Abb. 5.4D zeigt, dass der Ursprung des Kraft-Koordinatensystems in den Punkt $\vec{r}_{SAW}^{(i)}$ gelegt wird, in dem die von TIDT (i) angeregte SAW auf das Modell trifft. An diesem Punkt ist die Volumenkraft $\vec{f}^{(i)}$ maximal und erfährt in Richtung $\vec{k}^{(i)}$ exponentielle Dämpfung mit der $1/e$ -Abklinglänge l_{2d-H2O} . Die Kraftverteilung in Richtung $\vec{q}^{(i)}$ hängt vom Schallpfad-Profil des TIDTs ab. Das SAW-Intensitätsprofil eines TIDTs lässt sich in guter Näherung durch einen sinc^2 -Ausdruck nachvollziehen. Für die in z -Richtung unabhängig angenommene Volumenkraft $\vec{f}^{(i)}$ ergibt sich:

$$\vec{f}^{(i)}(\vec{r}) = f_0 \vec{k}^{(i)} \exp\left(-\frac{(\vec{r} - \vec{r}_{SAW}^{(i)}) \cdot \vec{k}^{(i)}}{l_{2d-H2O}}\right) \text{sinc}^2\left(\frac{(\vec{r} - \vec{r}_{SAW}^{(i)}) \cdot \vec{q}^{(i)}}{b_{TIDT}}\right) \quad (5.8)$$

Dabei bestimmt der Parameter b_{TIDT} die Breite des Schallpfades und wurde für die Simulationen so angepasst, dass die Wirbelpositionen im simulierten Strömungsprofil mit den experimentellen Wirbelpositionen übereinstimmen. Es zeigt sich, dass die so ermittelten Approximationen für die Schallpfad-Profile von TIDT I und TIDT II weitgehend mit SAW-Intensitätsprofilen übereinstimmen, die nach der ASoW-Methode von Kapitel 4.4.2 berechnet werden (vgl. im Anhang Abb. A.9). Der analytische Ausdruck (5.8) für $\vec{f}^{(i)}$ wird in COMSOL Multiphysics implementiert und wie in Gl. (4.61) mit $f_0 = 1$ auf das Fluid-Reservoir angewendet. Das so gewonnene Geschwindigkeitsfeld weist in weiten Bereichen eine vernachlässigbare Geschwindigkeit in z -Richtung u_z auf. Für die Simulation der Advektion wird demnach das 2d-Geschwindigkeitsfeld $\vec{u}_{2d} = (u_x, u_y)$ in einem xy -Schnitt auf halber Höhe $z = h/2$ des Fluid-Reservoirs betrachtet.

Um die Geschwindigkeit dieses Schnitts mit dem Parameter f_0 an das Experiment anzupassen, bedarf es folgender Vorarbeiten. Die gemessene mittlere Geschwindigkeit u_{mittel}^{Exp} des Experiments berücksichtigt Teilchen in unterschiedlichem Abstand z vom

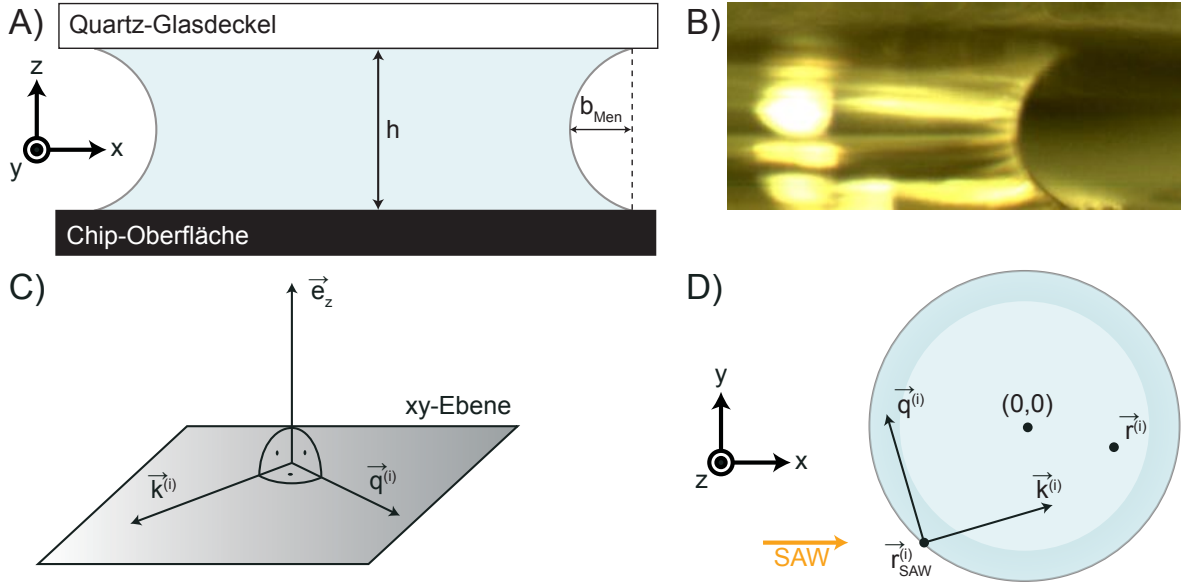


Abbildung 5.4 (A) Skizze des Katenoids der Höhe h und Meniskusbreite b_{Men} in Seitenansicht. (B) Aufnahme eines Katenoids im Experiment. (C) Die Einheitsvektoren $\vec{k}^{(i)}$ (Kraftrichtung), $\vec{q}^{(i)}$ und \vec{e}_z definieren ein Rechtssystem. (D) Schnitt des Katenoids in Draufsicht: Für TIDT (i) liegt der Ursprung dieses Rechtssystems im Eintrittspunkt der SAW $\vec{r}_{SAW}^{(i)}$. Der globale Ursprung $(0,0)$ befindet sich in der Mitte des Katenoids.

Boden. In der Simulation berechnet man deshalb die mittlere Geschwindigkeit $u_{2d-mittel}^{Calc}$ durch Integration des Geschwindigkeitsprofils und erhält folgende Abhängigkeit von der Maximalgeschwindigkeit u_{2d-max} bei $z = h/2$ ¹:

$$u_{2d-mittel}^{Calc} = \frac{1}{h} \int_0^h u_{2d}(z) dz \approx \frac{1}{1.45} u_{2d-max} \quad (5.10)$$

Mit Gl. (5.10) kann so die Maximalgeschwindigkeit u_{max}^{Exp} in Tab. 5.4 aus u_{mittel}^{Exp} bestimmt werden. Da sich u_{max}^{Exp} im Jet des Schnitts auf $z = h/2$ einstellen muss, kann in COMSOL Multiphysics durch Variation des Parameters² $f_0 = u_{max}^{Exp}/u_{2d-max}$ die Maximalgeschwindigkeit u_{2d-max} des Schnitts an die Maximalgeschwindigkeit des Experiments u_{max}^{Exp} angepasst werden.

Nach diesem Verfahren wird in jeder Konfiguration das von einem TIDT im alleinigen Betrieb erzeugte stationäre Geschwindigkeitsfeld \vec{u}_{2d} bei maximaler SAW-Leistung simuliert. Die simulierten Geschwindigkeitsfelder \vec{u}_{2d} und Strömungsprofile der verwendeten TIDTs sind in Abb. B.4 gezeigt, wobei die Parameter aus Tab. 5.5 verwendet wurden. Das Geschwindigkeitsfeld im Mono-Modus erhält man durch Skalierung des

¹In einem idealisierten parabolischen Geschwindigkeitsprofil würde gelten:

$$u_{2d-mittel}^{Calc} = \frac{1}{h} \int_0^h u_{2d-max} \left(1 - \left(\frac{z}{h/2} - 1 \right)^2 \right) dz = \frac{1}{1.5} u_{2d-max} \quad (5.9)$$

²Die Stokes-Gleichung ist linear.

	Dual-Modus		Schwenk-Modus	
	TIDT I \vec{f}_1	TIDT II \vec{f}_2	TIDT I \vec{f}_1	TIDT II \vec{f}_2
$\vec{k}^{(i)}$	(0, 1)	(1, 0)	(0.410, 0.912)	(0.935, 0.355)
$\vec{q}^{(i)}$	(-1, 0)	(0, 1)	(-0.912, 0.410)	(-0.355, 0.935)
$\vec{r}_{SAW}^{(i)} [\mu\text{m}]$	(0, -705)	(-746, -79.3) (-750, -26.2) (-750, 26.1) (-746, 77.6)	(-456, -524)	(-545, -385)
$b_{TIDT} [\mu\text{m}]$	60	45	60	45
$l_{2d-H_2O} [\mu\text{m}]$	406			
$f_0 []$	253.6	111.4	126.5	138.2

Tabelle 5.5 Übersicht der Simulationseinstellungen für verwendete Mischkonfigurationen. Das Geschwindigkeitsfeld im Mono-Modus wird durch Skalierung des Geschwindigkeitsfelds von TIDT II im Dual-Modus gewonnen. Um die entsprechenden Halbwertsbreiten des Schallpfad-Profiles zu erhalten müssen die Werte b_{TIDT} mit 2.783 multipliziert werden.

von TIDT II verursachten Geschwindigkeitsfelds im Dual-Modus auf die entsprechende Maximalgeschwindigkeit im Mono-Modus. Alle Geschwindigkeitsfelder werden für die Simulation der Advektion exportiert.

5.2.4 Simulation der Advektion

Der Mischvorgang der Beads wird durch die Advektion von nicht-wechselwirkenden Punktteilchen numerisch simuliert. Die extrem geringen Trägheitseffekte der Beads werden so in der Simulation vernachlässigt [Purcell77]. Der Anteil an Beads in der zum Wasser hinzugefügten Lösung beträgt etwa $7 \cdot 10^{-3}$, am Gesamtvolumen etwa $6 \cdot 10^{-4}$. Durch die geringe Größe der Beads und die hohe Verdünnung können deshalb hydrodynamische Wechselwirkungen vernachlässigt werden [Talkner06, Dhont96]. In diesem Fall folgen die Teilchen dem Geschwindigkeitsfeld \vec{u}_{2d}^{adv} der Flüssigkeit:

$$\begin{aligned}\dot{R}_x(t) &= u_{2dx}^{adv}(\vec{R}, t) \\ \dot{R}_y(t) &= u_{2dy}^{adv}(\vec{R}, t)\end{aligned}\tag{5.11}$$

Um nun die zeitliche Modulation der SAW-Leistung und damit der Geschwindigkeitsfelder im Fluid-Reservoir einzubeziehen, muss i.a. die zeitabhängige Stokes-Gleichung mit zeitlich variierenden Volumenkräften gelöst werden. Diese aufwändigen zeitabhängigen Analysen sind in unseren Experimenten nicht nötig, denn sowohl im Dual-Modus als auch im Schwenk-Modus sind die verwendeten Frequenzen < 0.7 Hz, und damit klein gegenüber der Relaxationsfrequenz der Flüssigkeit ≈ 6.6 Hz [Talkner06]. Die Flüssigkeit nimmt ihr asymptotisches Geschwindigkeitsfeld also sehr viel schneller an, als die

Modus	$a^{(1)}(t)$	$a^{(2)}(t)$
Dual-Modus	$-0.5 \cos(2\pi \nu t) + 0.5$	1
Mono-Modus	0	1
Schwenk-Modus	$0.5 \cos(2\pi \nu_{Sch} t) + 0.5$	$0.5 \sin(2\pi \nu_{Sch} t) + 0.5$

Tabelle 5.6 Übersicht der Modulationsfunktionen $a^{(i)}(t)$ für verwendete Mischkonfigurationen.

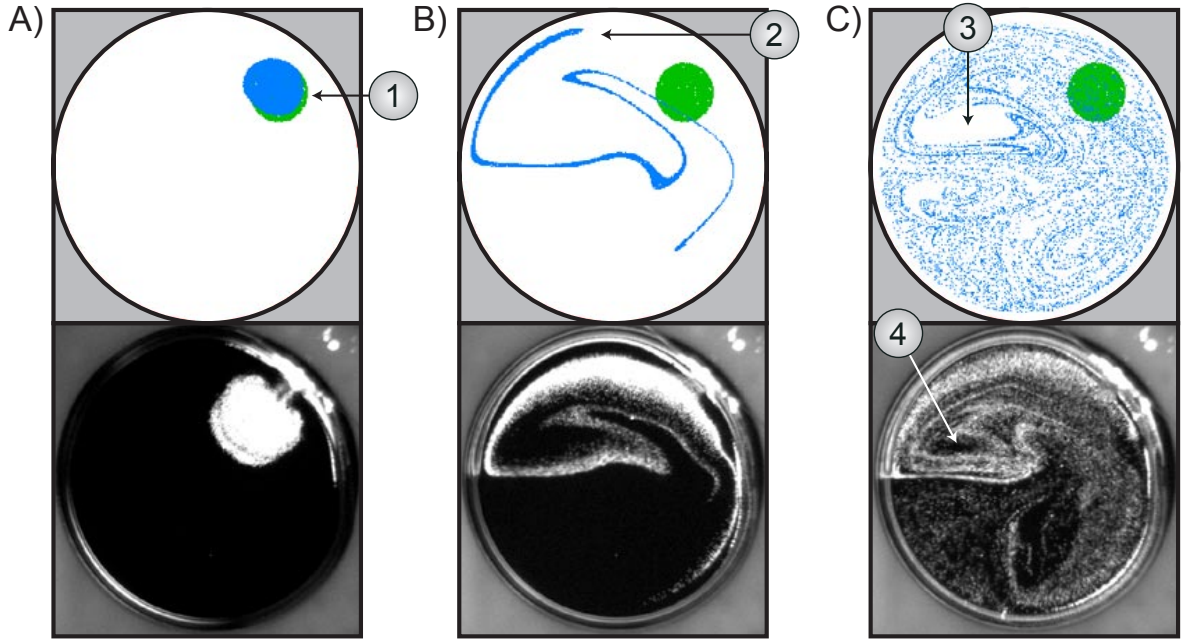


Abbildung 5.5 Vergleich der simulierten Advektion von 10^4 Punktteilchen mit dem entsprechenden Experiment (vgl. mischer.mov auf DVD): Durch die Wahl des Schnitts mit maximaler Geschwindigkeit in der Mitte des Katenoids für die Simulation werden alle bei (1) startenden Beads in (2) abtransportiert. Die ungemischte Zone (3) ist im Experiment (4) ebenfalls sichtbar.

Volumenkräfte zeitlich verändert werden. Wir verwenden deshalb im vorigen Abschnitt die stationäre Stokes-Gleichung zur Simulation der Geschwindigkeitsfelder $\vec{u}_{2d}^{(i)}$, wie sie von den einzelnen TIDTs (i) unabhängig verursacht werden. Diese Geschwindigkeitsfelder kombinieren wir mit zeitabhängigen Vorfaktoren $a^{(i)}(t)$, welche die Modulation beinhalten, zum Geschwindigkeitsfeld für die Simulation der Advektion \vec{u}_{2d}^{adv} :

$$u_{2d}^{adv}(\vec{R}, t) = a^{(1)}(t) u_{2d}^{(1)}(\vec{R}) + a^{(2)}(t) u_{2d}^{(2)}(\vec{R}) \quad (5.12)$$

Die in diesem Abschnitt vorgestellte 2d-Advektion der Teilchen simuliert Dr. Marcin Kostur (Theoretische Physik I, Universität Augsburg), indem er zunächst die Geschwindigkeitsfelder des letzten Abschnitts einliest und mit 2d-Splines interpoliert. Analog zum Experiment definiert er 10^4 Punktteilchen homogen um die Injektionsstelle im Experiment (vgl. Abb. 5.5A (1)). Das Geschwindigkeitsfeld \vec{u}_{2d}^{adv} erhält er aus Gl. (5.12), indem er die interpolierten Geschwindigkeitsfelder mit den Funktionen $a^{(i)}(t)$ nach Tab. 5.6 moduliert. So können die einzelnen Teilchentrajektorien nach Gl. (5.11) iterativ verfolgt werden, wodurch für jeden Zeitpunkt der Vergleich zwischen Experiment

und Simulation möglich ist (vgl. *mischer.mov* auf DVD). Wie Abb. 5.5B zeigt, kann die Faltung im Experiment sehr gut simuliert werden, allerdings werden alle Teilchen abtransportiert (2). Solche Diskrepanzen müssen sich bei der 2d-Modellierung eines 3d-Systems ergeben. Die Simulation verwendet Geschwindigkeitsfelder des xy-Schnitts mit maximaler Fluid-Geschwindigkeit auf halber Höhe des Fluid-Reservoirs. Im Gegensatz dazu befinden sich im Experiment Beads in einer Höhe z mit erheblich geringeren Fluid-Geschwindigkeiten, weshalb im Experiment die Beads länger am Injektionspunkt verweilen. Dennoch werden im Verlauf der Mischung in Abb. 5.5C z.B. ungemischte Zonen im Experiment (4) auch in der Simulation (3) wiedergegeben. Die Grundlagen für eine numerische Simulation der chaotischen Advektion sind damit geschaffen. Um einen quantitativen Vergleich der Mischungsqualität zwischen Experiment und Simulation durchzuführen, wird im nächsten Abschnitt ein Maß für die Mischungsqualität eingeführt.

5.2.5 Quantifizierung der Mischungsqualität

Die Standardabweichung σ der Grauskalenwerte eines experimentellen Bilds ist ein statistischer Parameter, der i.a. für die Beurteilung der Mischungsqualität herangezogen wird [Bottausci04, Stroock02]. Die Standardabweichung birgt allerdings einen entscheidenden Nachteil, wenn mehrere Experimente verglichen werden sollen. Abweichungen in der Anfangskonzentration der zu mischenden Substanz schlagen sich direkt in der Standardabweichung nieder. Betreibt man also die gleiche Konfiguration mit zwei verschiedenen Konzentrationen, so erhält man verschiedene Standardabweichungen. In diesem Abschnitt werden wir den inversen Variationskoeffizient als konzentrationsunabhängigen Indikator der Mischungsqualität einführen. Dabei wird nicht das gesamte Fluid-Reservoir ausgewertet, sondern ein Kreisrand von etwa $190\,\mu\text{m}$ ausgespart, um Randeffekte auszuschließen.

Im Histogramm der Grauskalenwerte g_i verlaufen Mischexperimente stets ähnlich. Zu Beginn erkennt man einen signifikanten Anteil um $g_i \approx 0$, der vom leeren Gebiet des Fluid-Reservoirs stammt. Gleichzeitig befindet sich ein Anteil um $g_i \approx 255$, der von den Beads herrührt und im allgemeinen überbelichtet ist. Im Verlauf des Mischexperiments verschmelzen diese beiden Anteile zu einer glockenförmigen Verteilung um den Mittelwert der Grauskalenwerte $\overline{g_i}$, aus der die Mischungsqualität hervorgeht (vgl. *histogramm.mov* auf DVD). Die Form der Glockenkurve wird nicht nur von der Mischungsqualität, sondern auch der Homogenität der Ausleuchtung verändert, die darum in allen Experimenten dieser Arbeit gleich belassen wird. Die Breite der Verteilung und die Lage des Mittelwerts $\overline{g_i}$ wird durch die Anfangskonzentration der Beads beeinflusst. Im Gegensatz dazu ist der Variationskoeffizient $c_V = \sigma/\overline{g_i}$ ein dimensionsloses relatives Streumaß [Sachs97], das für ideale Mischung gegen Null strebt. Im Vergleich mehrerer Experimente zeigt das Maximum des inversen Variationskoeffizienten (ICV) c_V^{-1} deshalb die beste Mischungsqualität an.

Für Experimente mit Fluoreszenz-Tinten kann der ICV so eingesetzt werden. Bei Ex-

perimenten mit Beads hingegen ergibt sich eine weitere Schwierigkeit. Die injizierte Lösung enthält etwa 10^5 Beads (Größe ≈ 0.5 Px), die bei idealer Mischung einen mittleren Abstand von etwa $15 \mu\text{m}$ einnehmen, der ungefähr 5 Px der Kamera Hamamatsu C8484-05C in der gewählten Vergrößerung des Mikroskops entspricht. Die Standardabweichung wird durch diese inhärente Rauigkeit des Systems nach unten und damit der ICV nach oben begrenzt. Deshalb ist eine Auswertung auf Basis einzelner Pixel der Kamera nicht sinnvoll. In [Mathew05] wurde bereits eine Multiskalen-Version der Varianz zur Beurteilung der Mischungsqualität auf unendlichen Gebieten abgeleitet. Im Experiment verfügt man aber über endliche Fluid-Reservoirs, weshalb der Formalismus so nicht anwendbar ist und modifiziert werden muss.

Wir erweitern die Berechnung des ICV auf eine Skala s wie folgt: Zunächst wird das Gebiet mit einem Gitter in Boxen der Größe $s \times s$ zerlegt. Der Mittelwert $d(j, s)$ der Box (j) lässt sich aus den beinhalteten Grauskalenwerten errechnen. Die Abweichung $d_V(j, s)$ des Boxmittelwerts $d(j, s)$ vom globalen Mittelwert \bar{g}_i wird dann zur Berechnung der Standardabweichung $\sigma(s)$ verwendet. Aufgrund der Endlichkeit und Form des Fluid-Reservoirs befinden sich einige Boxen nicht gänzlich im betrachteten Gebiet. Grauskalenwerte außerhalb des Gebiets werden bei der Berechnung des Boxmittelwerts $d(j, s)$ nicht berücksichtigt, weshalb den betroffenen Mittelwerten eine schlechtere Statistik zugrunde liegt. Um eine Beeinflussung der Standardabweichung zu vermeiden, wird jede Abweichung $d_V(j, s)$ deshalb mit $w(j)$ gewichtet:

$$\sigma(s) = \left(\frac{\sum_j w(j) d_V^2(j, s)}{\sum_j w(j) - 1} \right)^{0.5} \quad (5.13)$$

Die Gewichtung $w(j)$ ergibt sich aus der Division der Anzahl berücksichtigter Pixel (zur Berechnung des Boxmittelwerts $d(j, s)$) durch die Boxgröße s^2 . Somit kann der Mischindikator ICV auf einer Skala s ausgewertet werden:

$$c_V^{-1}(s) = \sigma(s) / \bar{g}_i \quad (5.14)$$

Für unsere Experimente wird die Skala $s = 24 \text{ Px} \approx 74 \mu\text{m}$ gewählt. So befinden sich in einer Box etwa $4 \cdot 10^2$ Beads für eine gute Statistik des Boxmittelwerts.

Die Berechnung des Mischindikators ICV in den Simulationen der Advektion von Dr. Marcin Kostur erfolgt nach derselben Prozedur. Anstatt der Grauskalenwerte wird dabei die Anzahl an Teilchen in einer Box ausgewertet.

5.2.6 Vergleichbarkeit der Experimente

Damit die Mischungsqualität verschiedener Experimente verglichen werden kann, müssen einige experimentelle Einflussfaktoren bedacht werden. Im letzten Abschnitt wurde bereits erwähnt, dass eine inhomogene Ausleuchtung des ausgewerteten Gebiets zu einer Verzerrung der Verteilung im Histogramm führt. Deshalb wurde die Ausleuchtung während des Experiments nicht variiert.

Weiterhin neigt die Quecksilberdampflampe zum Flackern, was sich auf den Mischindikator ICV auswirkt. Deshalb wurden für alle Vergleiche von Bildern der aufgenommenen Filme und Werte des Mischindikators ICV Zeitpunkte ausgewählt, an denen die Lampe nicht flackert. Diese Zeitpunkte lassen sich einfach im zeitlichen Verlauf des Mittelwerts $\overline{g_i}$ ermitteln. Dieser steigt und fällt sprunghaft, wenn die Lampe beim Flackern aufleuchtet und abdunkelt.

Bei der zeitlichen Verfolgung des Mischindikators ICV ist zu beachten, dass sich zu Beginn einige Teilchen nicht im Auswertungsbereich befinden und zudem anfangs im Bereich der Bead-Injektion das Kamerabild stark überbelichtet ist. Zu diesen Zeitpunkten ergibt die Berechnung des Mittelwerts $\overline{g_i}$ keinen repräsentativen Wert. Das Gleiche gilt für Zeitpunkte, an denen die Lampe flackert. Darum wird in Gl. (5.14) grundsätzlich der Mittelwert des letzten aufgenommenen Kamerabildes (ohne Flackern) für $\overline{g_i}$ eingesetzt. In diesem Kamerabild kommen i.a. keine überbelichteten Zonen vor.

Alle Versuche dieses Kapitels wurden auf einem Chip ausgeführt. Zwischen den einzelnen Experimenten wurde der Chip vom Probenhalter entfernt, die Unterseite mit Aceton von der Wärmeleitpaste befreit und dann für 3 min in Reinstwasser im Ultraschallbad (Bandelin Sonorex Super10P) bei 100% Leistung gereinigt. Wie in Kapitel 5.2.2 angesprochen beträgt die Kühltemperatur des Probensockels im Dual-Modus $T = 12^\circ \text{C}$ und im Mono-Modus und Schwenk-Modus $T = 10^\circ \text{C}$, um bei den längeren Laufzeiten die Abdampfung des Wassers zu verringern.

Zusammen mit den gemessenen Fluid-Geschwindigkeiten nach Tab. 5.4 kann so für die Auswertungen der Mischexperimente im Dual-Modus und für den Vergleich zwischen Mono-Modus und Schwenk-Modus jeweils eine gemeinsame Basis gefunden werden.

5.3 Ergebnisse zur chaotischen Advektion

5.3.1 Optimales Mischen im Dual-Modus

In diesem Abschnitt werden die Experimente im Dual-Modus präsentiert, die sich voneinander durch die Modulationsfrequenz ν von TIDT I unterscheiden.

Die Abb. 5.6A-F (vgl. dualjet.mov auf DVD) zeigen für jede betriebene Frequenz ν die zeitliche Evolution des Mischvorgangs anhand dreier tonwertkorrigierter Einzelbilder (zu Zeitpunkten ohne Flackern). Darin ist zunächst erkennbar, dass die Beads derart injiziert sind, dass der Anfangszustand der einzelnen Experimente vergleichbar ist. Der skizzierte Kreis bei $t = 0 \text{ s}$ zeigt die für die Berechnung des Mischindikators ICV einbezogene Fläche. Wie in Kapitel 5.2.6 beschrieben befindet sich z.B. in Abb. 5.6B nicht die gesamte injizierte Bead-Menge im Kreis. Außerdem sind die Bilder stark überbelichtet, weshalb die Berechnung des Mittelwerts $\overline{g_i}$ anhand der Anfangsbilder nicht sinnvoll ist.

Darüber hinaus ist offensichtlich nach $t = 105.6 \text{ s}$ ein Optimum der Mischungsqualität für den Betrieb mit der Frequenz $\nu = 0.17 \text{ Hz}$ erreicht. Der Grenzfall mit zwei konstant

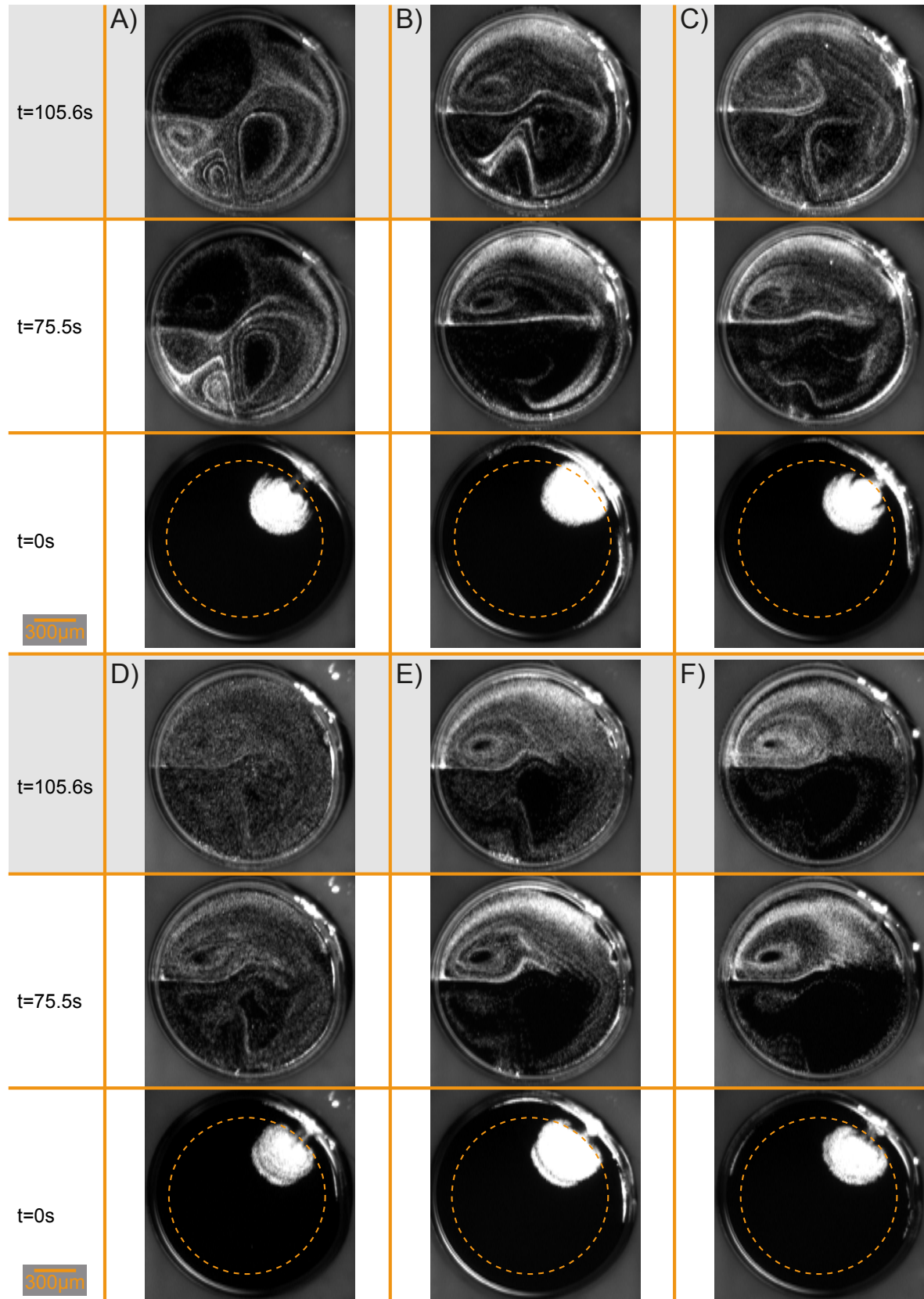


Abbildung 5.6 Zeitliche Evolution des Mischvorgangs für folgende Modulationsfrequenzen ν : (A) 0 Hz, P_y maximal, (B) $4.2 \cdot 10^{-2}$ Hz, (C) $8.3 \cdot 10^{-2}$ Hz, (D) 0.17 Hz, (E) 0.33 Hz, (F) 0.67 Hz (vgl. dualjet.mov auf DVD). Der Kreis bei $t = 0$ s zeigt den Auswertungsbereich für den Mischindikator ICV.

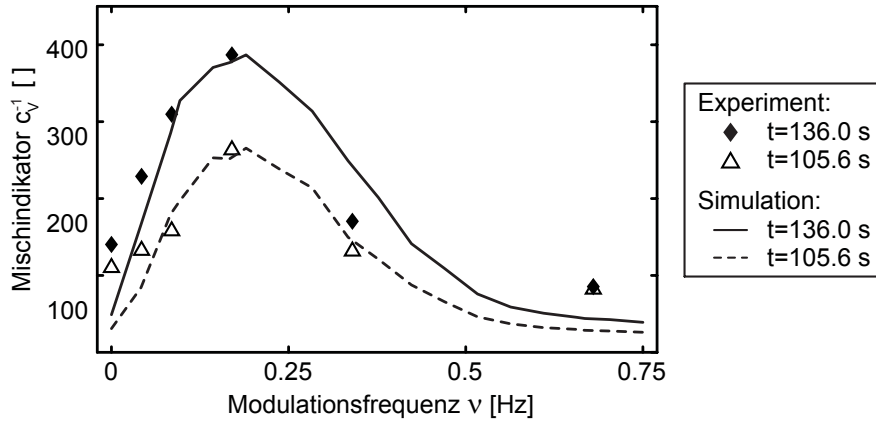


Abbildung 5.7 Der Mischindikator ICV wird zur Zeit $t = 105.6$ s und $t = 136$ s für die Experimente ausgewertet und mit dem ICV der simulierten Advektion zum gleichen Zeitpunkt verglichen. Dabei werden die simulierten ICV-Kurven auf das ICV-Maximum des Experiments zum jeweiligen Zeitpunkt skaliert.

betriebebenen IDTs $\nu = 0$ Hz (P_y maximal) maximiert zwar die ins Fluid-Reservoir eingekoppelte SAW-Leistung, führt aber zu geringer Mischungsqualität und ist deshalb denkbar ungünstig. Für sehr schnelle Störungen $\nu = 0.67$ Hz strebt die Mischungsqualität gegen den Fall des Mono-Modus.

Diese optischen Eindrücke der Mischungsqualität werden in Abb. 5.7 mit dem Mischindikator ICV quantifiziert. Es ergibt sich ein deutliches Maximum der Mischungsqualität um $\nu = 0.17$ Hz für beide ausgewerteten Zeitpunkte. Zusätzlich kann der ICV von Dr. Marcin Kostur in der simulierten Advektion berechnet werden. Da die Werte des ICV der Grauskalenwerte g_i des experimentellen Bildes nicht mit denen des ICV der Punktteilchen in der simulierten Advektion übereinstimmen können, werden die simulierten ICV-Kurven auf das ICV-Maximum des Experiments zum entsprechenden Zeitpunkt skaliert. Die so ermittelten simulierten ICV-Kurven modellieren gut die Glockenform der experimentellen ICV-Kurven. Darüber hinaus ergibt die Simulation ebenfalls eine optimale Modulationsfrequenz bei $\nu_{opt}^{Exp} \approx 0.17$ Hz. Im Prinzip können aus den Unsicherheiten der Fluid-Geschwindigkeiten Fehlerbalken für die Modulationsfrequenz berechnet werden. Allerdings sind diese großen Unsicherheiten eine direkte Folge der 2d-Modellierung des Systems (siehe Gl. (5.10)). Die Mittelwerte der Fluid-Geschwindigkeiten im Dual-Modus sind nach Tab. 5.4 sehr einheitlich. Eine Umrechnung der Unsicherheiten ist als Fehlerabschätzung deshalb nicht angebracht. Tatsächlich bedarf jede Modulationsfrequenz einer eigenen Betrachtung, inwiefern die Annahme eines 2d-Systems für den betreffenden Fall gerechtfertigt ist. Im Vergleich vollzieht die simulierte Advektion das Experiment am besten bei der optimalen Modulationsfrequenz nach und zeigt Abweichungen wenn man gegen die Grenzkonfigurationen $\nu = 0$ Hz und $\nu = 0.67$ Hz strebt (vgl. vglsimexp.mov auf DVD). Diese Abweichungen werden so auch vom ICV in Abb. 5.7 wiedergegeben. Zusammenfassend kann die 2d-Simulation der Advektion die Form der ICV-Kurve erklären und die optimale Modulationsfrequenz auf etwa 10% genau vorgeben.

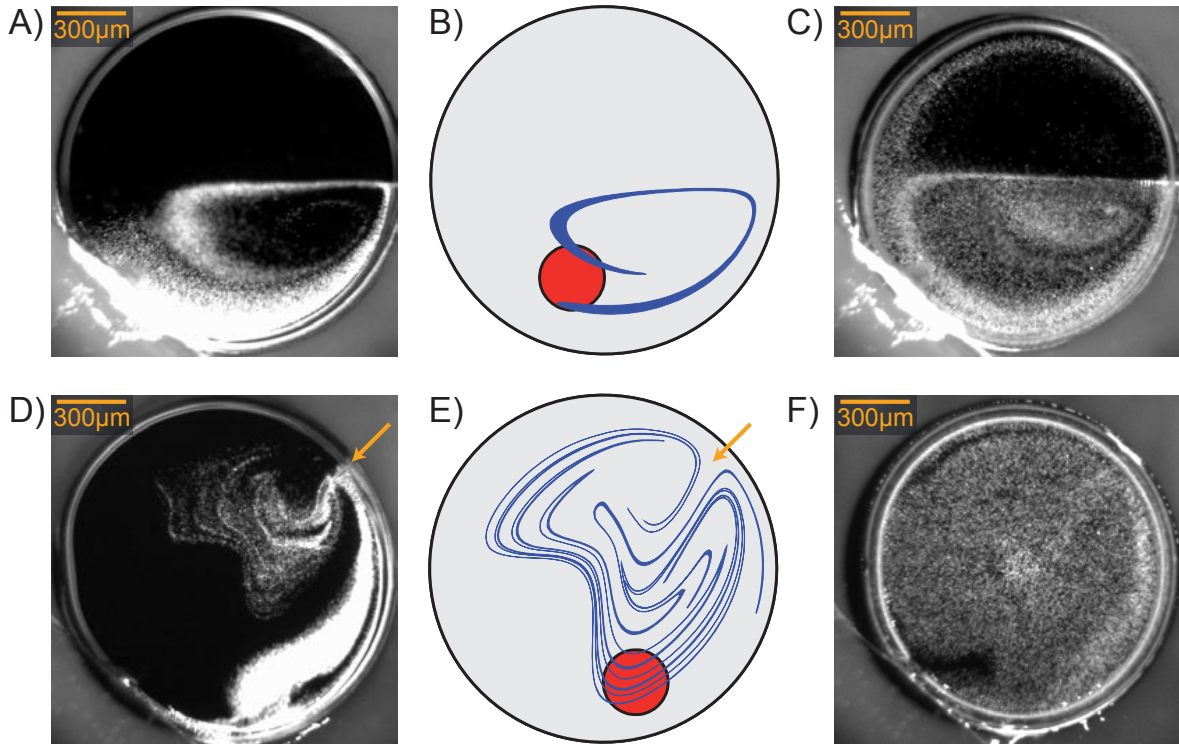


Abbildung 5.8 Diese Übersicht zeigt auf der linken Seite das experimentelle Bild nach $t = 70$ s. In der Mitte ist die kreisförmige Fläche injizierter Teilchen (rot) eingezeichnet und die Faltung des Teilchen-Gebiets nach $t = 70$ s von Dr. Marcin Kostur simuliert. Zur Rechten ist der Endzustand im Experiment nach $t = 414.7$ s dargestellt. Im Mono-Modus ist die Faltung in (A) und (B) beschränkt. Die folglich Mischung in der Hälfte der Injektion (C) ist nicht optimal. Der Schwenk-Modus erzeugt in (D) und (E) starke Streckung und Faltung durch das Schwenken des Jets um die mit Pfeilen markierten Stellen. Dies führt in (F) zu vergleichbarer Mischungsqualität wie im optimalen Fall des Dual-Modus.

5.3.2 Chaotische Advektion mit einem Jet

Der Grenzfall $\nu \rightarrow \infty$ des Dual-Modus entspricht dem Mono-Modus, wie bereits in Abb. 5.6F absehbar ist und verspricht begrenzte Mischungsqualität. Tatsächlich erkennt man nach $t = 70$ s im experimentellen Bild Abb. 5.8A und der entsprechenden Simulation des Teilchen-Gebiets von Dr. Marcin Kostur (Abb. 5.8B) nur wenig Streckung und Faltung. Deshalb erzielt man in Abb. 5.8C nach $t = 414.7$ s selbst in der Hälfte der Bead-Injektion nur eine unbefriedigende Mischungsqualität. In Abb. 5.8D und E erzeugt der Schwenk-Modus einen Jet, der um die mit Pfeilen markierten Stellen in einem Winkelbereich von 44° schwenkt. Die Streckung und Faltung des Teilchen-Gebiets ist dadurch erheblich ausgeprägter und führt nach $t = 414.7$ s in Abb. 5.8F zu vergleichbarer Mischungsqualität wie im optimalen Fall des Dual-Modus (vgl. Abb. 5.6D und singlejet.mov auf DVD).

Der Mischindikator ICV ist für den Schwenk-Modus und den Mono-Modus in Abb. 5.9 gegen die Zeit aufgetragen. Selbst für große Zeiten $t > 400$ s erreicht man so im Mono-Modus eine Mischungsqualität von lediglich $c_V^{-1} \approx 74$, die geringfügig unter der Konfiguration $\nu = 0.67$ Hz des Dual-Modus $c_V^{-1} \approx 85$ liegt. Der Schwenk-Modus

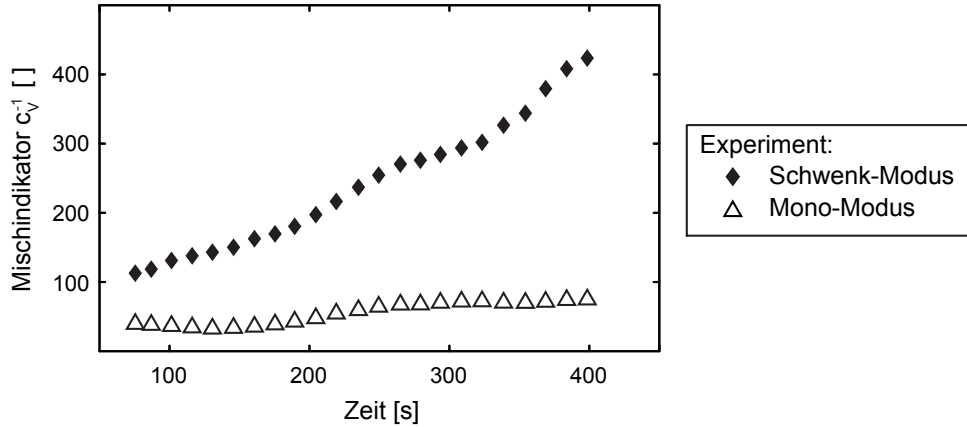


Abbildung 5.9 Der Mischindikator ICV bleibt im Mono-Modus selbst für große Zeiten $t > 400$ s unter $c_V^{-1} \approx 74$. Im Gegensatz dazu steigt die Mischungsqualität im Schwenk-Modus stetig an und übertrifft sogar den optimalen Fall des Dual-Modus.

hingegen verursacht eine kontinuierliche Verbesserung der Mischungsqualität bis zu Werten von $c_V^{-1} \approx 438$. Dies übertrifft sogar die Mischungsqualität im optimalen Fall des Dual-Modus $c_V^{-1} \approx 387$. Einerseits bedarf es im Schwenk-Modus etwa 2.7-mal länger als im Dual-Modus, um diese Mischungsqualität herbeizuführen. Andererseits ist die Fluid-Geschwindigkeit im Schwenk-Modus etwa halb so groß wie im Dual-Modus (vgl. Tab. 5.4), wodurch also eine Verlangsamung um einen Faktor 2 bereits durch die Konfiguration vorgegeben ist.

5.4 Zusammenfassung

In diesem Kapitel zeigten wir die grundlegenden Probleme des Mischens in der Mikrofluidik auf. Kleine Reynolds-Zahlen belegen die Überdämpfung der Flüssigkeit, wodurch mischende Turbulenzen verschwinden. Für dieses mikrofluidische Regime wurden in den letzten Jahren zahlreiche Ansätze zum Mischen mit Diffusion in Kanälen verwirklicht [Knight98, Gobby01, Hessel03, Hardt03, Wu05]. Dabei wurden i.a. Abmessungen soweit reduziert, dass Diffusion in der zur Verfügung stehenden Zeit eine Homogenisierung herbeiführen kann. Sobald aber die Diffusionskonstante einer Komponente gering ist, die zu mischende Geometrie beliebige Form annimmt oder die Abmessungen nicht verkleinerbar sind, stoßen diffusive Ansätze an ihre Grenzen.

Diese Arbeit setzte deshalb den von Hassan Aref [Aref84] vorgestellten Effekt der chaotischen Advektion um, der keine Bedingungen an Geometrie, Abmessungen oder Art der zu mischenden Komponenten stellt. Durch Einsatz zeitlich modulierter Strömungsprofile [Aref84, Meleshko96, Aref00] wird so ein System aktiv gemischt, dass im bislang nicht erforschten advektiv gedämpften Bereich [Nguyen04] mit niedriger Reynolds-Zahl Re und hoher Péclet-Zahl Pe angesiedelt ist. Dazu werden in einem $\varnothing 1.5$ mm Fluid-Reservoir der Höhe $240 \mu\text{m}$ ($r_P = 0.75 \mu\text{m}$)-Beads injiziert und gemischt. Die Größe der Beads und des Fluid-Reservoirs vergrößern Zeitskalen der diffusiven Mischung in den Bereich $5 \cdot 10^5$ s ($Pe > 4 \cdot 10^5$) bei gleichzeitigem Auslöschen von Turbulenzen durch die

niedrige Reynolds-Zahl $Re = 0.07$. In diesem „umischbaren“ System spielen sekundäre Mischeffekte wie Turbulenzen und Diffusion darum eine vernachlässigbare Rolle.

Das Fluid-Reservoir wurde auf einem Chip mit zwei TIDTs verwirklicht, die zahlreiche verschiedene Strömungsprofile erzeugen können. Die beiden präsentierten Konfigurationen Dual-Modus und Schwenk-Modus zeigen dabei alternative Wege zur Realisierung der chaotischen Advektion auf. Der Dual-Modus verwendet ein konstantes und ein weiteres räumlich getrenntes, zeitlich moduliertes Strömungsprofil zur Mischung. Der Schwenk-Modus überlagert zwei zeitlich modulierte Strömungsprofile am selben Ort und erzeugt durch Phasenverschiebung ein schwenkendes Strömungsprofil. Für Quantifizierung und Vergleich der Mischungsqualität führten wir den inversen Variationskoeffizient ICV als dimensionslosen konzentrationsunabhängigen Mischindikator ein. Dieser zeigte vergleichbare Mischungsqualität für den Schwenk-Modus und das optimal parametrisierte Experiment des Dual-Modus. Durch Simulation der Strömungsprofile und Anpassung der Geschwindigkeit an die durch Particle-Tracking bestimmten Fluid-Geschwindigkeiten des Experiments stellten wir Daten für eine 2d-Simulation der Teilchen-Advektion von Dr. Marcin Kostur zur Verfügung. Die Auswertung des Mischindicators ICV in der 2d-Simulation konnte die Form der Abhängigkeit des ICV von der Modulationsfrequenz im Dual-Modus modellieren. Des weiteren erlaubte sie eine Bestimmung der optimalen Modulationsfrequenz mit einer Genauigkeit von etwa 10%. Diese ausgezeichnete Deterministik bestätigt die Synergieeffekte, die im Bereich chaotischer Advektion zwischen Simulation und Experiment erwartet wurden [Ottino04A].

Kapitel 6

Sortieren in der SAW-Fluidik

In vielen diagnostischen Anwendungen kommen heutzutage Geräte zum Einsatz, die in Anschaffung und Unterhalt nur von Großlaboratorien finanziert werden können. Zur Detektion von Krebszellen dienen z.B. spezielle Zellsortierer (*fluorescence activated cell sorting, FACS*). Beim FACS werden die Zellen einer Gewebeprobe mit Farbstoffen markiert, wobei die Krebszellen aufgrund ihrer Struktur spezifisch Farbstoff einbauen. Dann saugt man die Zellen einzeln durch eine Kapillarnadel und detektiert die Intensität der betreffenden Farbstoffe unter Laserbestrahlung. Die erkannten Krebszellen werden dann mit einem Kondensator abgelenkt und von den anderen Zellen getrennt. Da sich im FACS Krebszellen in Luft bewegen, muss das Gerät besonders versiegelt werden. Die Kapillaren verfügen über eine extrem kleine Öffnung, um die Zellen einzeln passieren zu lassen, und sind dadurch schnell verstopft. Ein hohes Ziel der Lab-on-a-chip Forschung ist die Realisierung von Sortiermechanismen auf billigen Einwegchips (*disposables*), die direkt beim Arzt eingesetzt werden können. Einige Sortieransätze werden in diesem Kapitel kurz vorgestellt und kommentiert.

6.1 Sortieren mit Dielektrophorese

6.1.1 Theoretische Grundlagen

Geladene Teilchen wie z.B. DNA-Moleküle können im homogenen, statischen elektrischen Feld bewegt werden [Duong06, Strobl05]. Wenn Objekte anstatt einer Ladung ein permanentes Dipolmoment tragen, richten sie sich im homogenen Feld aus, eine Bewegung setzt jedoch erst in inhomogenen elektrischen Feldern ein. Für Partikel ohne Ladung und permanentes Dipolmoment kann die Dielektrophorese zur Migration eingesetzt werden.

Hierfür wird durch ein externes, elektrisches Wechselfeld $\vec{E}(t)$ ein Dipolmoment $\vec{m}(t)$ im Objekt induziert, das wiederum mit dem elektrischen Feld interagiert und dadurch eine zeitabhängige Kraft $\vec{F}(t)$ erzeugt:

$$\vec{F}(t) = (\vec{m}(t) \cdot \nabla) \vec{E}(t) \quad (6.1)$$

Für ein harmonisches Wechselfeld kann ein analytischer Ausdruck für die zeitlich gemittelte Kraft der dielektrophoretischen Wechselwirkung auf ein kugelförmiges Teilchen mit Radius r_P abgeleitet werden [Wang94]:

$$\langle \vec{F}(\nu, t) \rangle = 2\pi\epsilon_m r_P^3 \left[\operatorname{Re}(f_{CM}(\nu)) \nabla(E_{rms}^2) + \operatorname{Im}(f_{CM}(\nu)) \sum_{i=x,y,z} E_{i0}^2 \nabla\varphi_i \right] \quad (6.2)$$

$$E_{rms}^2 = 0.5 \sum_{i=x,y,z} E_{i0}^2 \quad (6.3)$$

$$f_{CM}(\nu) = \frac{\epsilon_p^*(\nu) - \epsilon_m^*(\nu)}{\epsilon_p^*(\nu) + 2\epsilon_m^*(\nu)} \quad (6.4)$$

Dabei bezeichnet E_{i0} die Amplitude des elektrischen Felds in den drei Raumrichtungen $i = x, y, z$ und E_{rms}^2 das Quadrat des effektiven Felds. Der sog. Clausius-Mossotti-Faktor f_{CM} beschreibt die Polarisierung des Objekts (ϵ_p^*) im umgebenden Medium (ϵ_m^*) und nimmt für ein kugelförmiges Teilchen die Form von Gl. (6.4) an. Da die Polarisierungen $\epsilon_m^*(\nu)$ und $\epsilon_p^*(\nu)$ von der Frequenz ν des elektrischen Felds abhängen, kann sich die Richtung und Betrag der Kraft $\langle \vec{F}(\nu, t) \rangle$ bei Variation der Frequenz ν ändern. Die φ_i sind die Phasenverschiebungen der jeweiligen Komponenten des elektrischen Felds.

Wenn im elektrischen Feld keine Phasengradienten vorkommen, vereinfacht sich Gl. (6.2) zu:

$$\langle \vec{F}(\nu, t) \rangle = 2\pi\epsilon_m r_P^3 \operatorname{Re}(f_{CM}(\nu)) \nabla(E_{rms}^2) \quad (6.5)$$

Die Kraft ist damit nur dann ungleich Null, wenn $\nabla(E_{rms}^2)$ aufgrund eines inhomogenen elektrischen Felds nicht verschwindet. Man unterscheidet dann für ein Teilchen zwei Arten von Dielektrophorese. Bei der negativen Dielektrophorese (*NDEP*) ist das Teilchen weniger polarisierbar als das Umgebungsmedium, wodurch $\operatorname{Re}(f_{CM}) < 0$ ist und das Teilchen von den Orten größten elektrischen Felds abgestoßen wird. Ist das Teilchen stärker polarisierbar als das umgebende Medium, so spricht man von positiver Dielektrophorese (*PDEP*). Dann gilt $\operatorname{Re}(f_{CM}) > 0$ und das Objekt migriert zu Bereichen größeren elektrischen Felds (im allgemeinen der Raum zwischen den Elektroden). Für eine Teilchensorte ändert sich die Polarisierung mit der Frequenz und damit die Art der Dielektrophorese.

Falls die an den Elektroden angelegten elektrischen Felder Phasengradienten erzeugen, muss der gesamte Ausdruck (6.2) betrachtet werden. Man spricht von Wanderwellen-Dielektrophorese (*travelling wave dielectrophoresis, TWDEP*), wenn Teilchen durch den Phasengradienten bewegt werden. Dazu muss im allgemeinen gleichzeitig negative Dielektrophorese vorherrschen, damit die Teilchen nicht zu den Elektroden gezogen werden und dort anhaften. TWDEP wird in dieser Arbeit nicht weiter eingesetzt.

Da die dielektrophoretische Kraft immer vom Volumen r_P^3 des Teilchens abhängt, bietet sich eine Größensortierung geradezu an. Technisch wird dies beispielsweise realisiert, indem Teilchen mit NDEP von Elektroden am Boden abgestoßen werden, wobei sich der Abstand vom Boden nach der NDEP-Kraft und damit der Teilchengröße richtet.

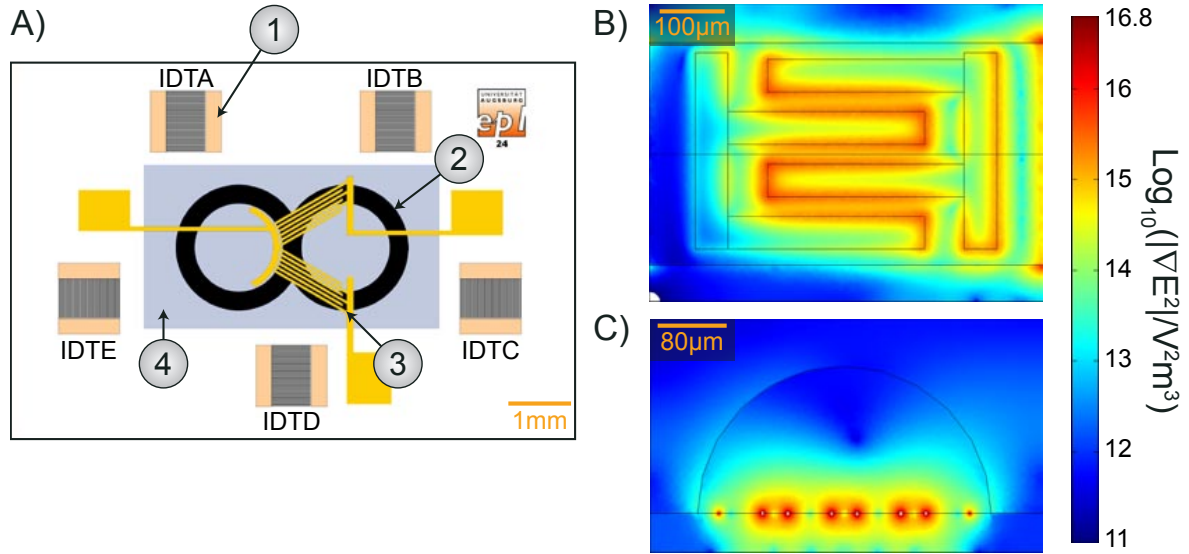


Abbildung 6.1 (A) Chip-Design eines NDEP-Umleitungs-Chips: Die IDTs (1) A-E treiben die Flüssigkeit in der hydrophilen Fläche (2) auf der SiO-Schicht (4) symmetrisch an. Teilchen können in der Strömung mit Führungsschienen (3) zwischen den beiden Kreisen umgeleitet werden. (B) Simulation von $|\nabla E^2|$ (Draufsicht): Zwischen den interdigitalen Elektroden und an deren Enden ist $|\nabla E^2|$ und damit die repulsive NDEP-Kraft maximal. (C) Simulation von $|\nabla E^2|$ (Querschnitt): Der Führungseffekt über den planaren Elektroden wirkt bis zu einer Höhe von etwa $25 \mu m$.

Die Strömung im Kanal besitzt durch den Einfluss der Ränder eine abstandsabhängige Geschwindigkeit, sodass die Teilchen nach einer gewissen Laufzeit getrennt werden (*field-flow fractionation*, [Wang98, Yang99]). In den nächsten Abschnitten werden für die Dielektrophorese andere Sortierkonzepte erörtert.

6.1.2 Umleitung mit NDEP

Aus Gl. (6.5) geht hervor, dass NDEP bei Teilchen zu einer Abstoßung von Bereichen hohen elektrischen Feldes führt. In diesem Abschnitt wird auf dieser Basis ein System von Führungsschienen entworfen, um Teilchen gezielt umzuleiten.

Das Chip-Design¹ in Abb. 6.1A zeigt in (1) die IDTs A-E (Konfiguration IDT1 nach Tab. B.2) mit denen die Flüssigkeit in der hydrophilen Bahn (2) symmetrisch angetrieben wird. Teilchen, die aufgrund ihres Radius eine geringe Diffusionskonstante besitzen, verweilen während des Betriebs durch die symmetrische, laminare Strömung bei kleiner Reynolds-Zahl $Re \approx 0.03$ in der Hälfte der Injektion [Purcell77]. Die interdigitale Struktur (3) besteht aus Führungselektroden, die Teilchen zwischen den beiden Kreisen der Bahn transportieren können. Die Benetzungsmodulation findet auf der SiO-Schicht (4) statt, die auch die Führungselektroden von der Flüssigkeit isoliert. Die 3d-Simulation in Abb. 6.1B verdeutlicht, dass $|\nabla E^2|$ und damit die NDEP-Kraft zwischen den interdigitalen Führungselektroden maximal ist. Ausgeprägte Maxima ergeben sich zudem

¹Dieser Chip wurde noch auf Substraten mit $9 \times 6 \text{ mm}^2$ gefertigt und mit Bonddrähten kontaktiert, da der Cantilever-Pin-Probenhalter noch nicht zur Verfügung stand.

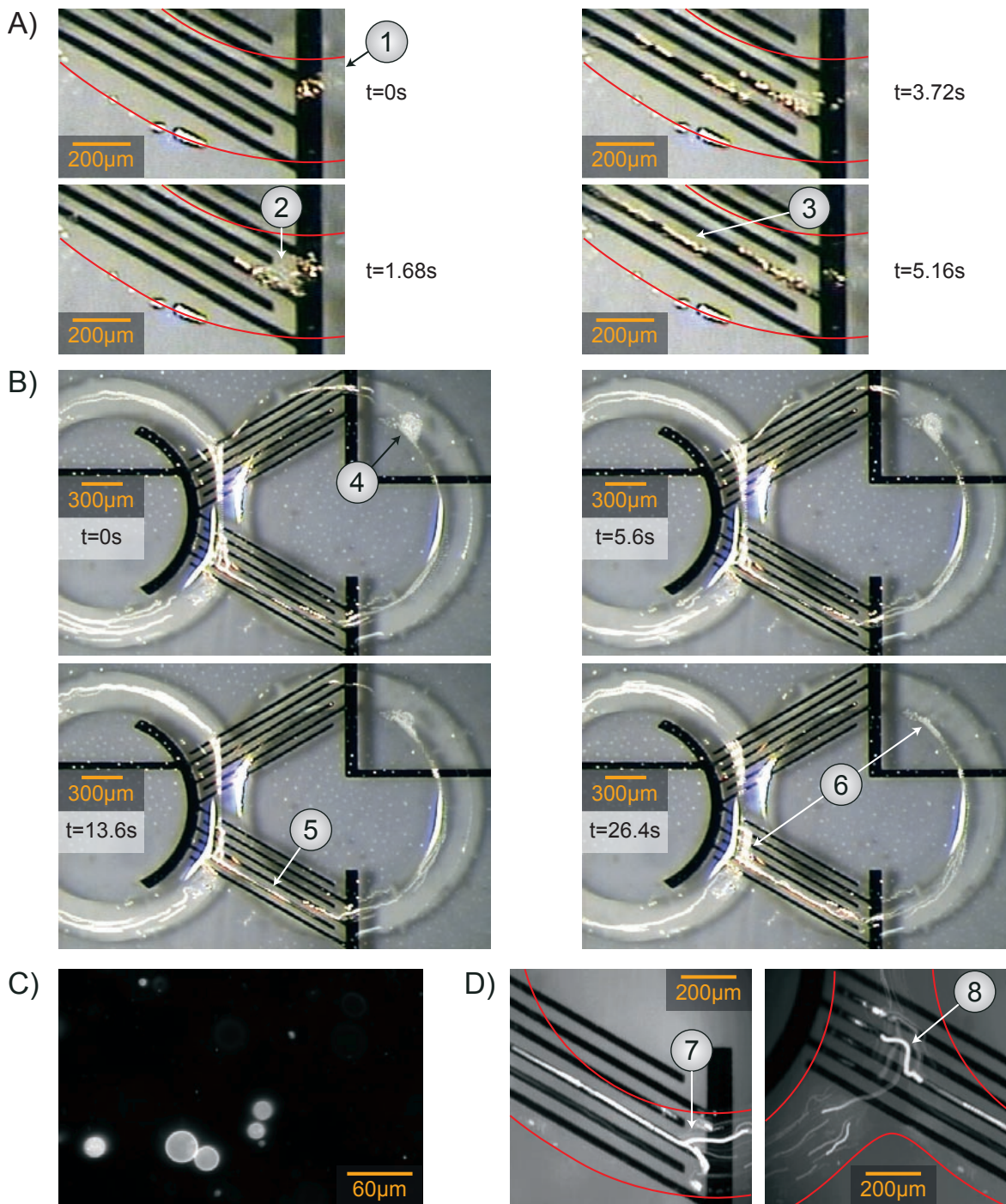


Abbildung 6.2 (A) ($r_P = 10\mu m$)-Beads (1) werden an den Enden der Führungselektroden (2) abgestoßen und über den Elektroden zu langen Ketten (3) fokussiert (Flüssigkeitsgrenzen rot eingezeichnet, vgl. `ndep_beads_schnur.mov` auf DVD). (B) Strömungsprofile (normale Mikroskopie): Injizierte Beads im rechten Kanal (4) wandern (als Ketten (5) fokussiert) zum linken Kreiskanal, wo sie von der viskosen Reibung der auftreffenden Strömung mitgerissen werden. Die Beads werden so in den linken Kreis transferiert (6) (vgl. `ndep_einzelbeads.mov` auf DVD). (C) Für weitere Tests werden Vesikel als biologisches Modellsystem eingesetzt. (D) Strömungsprofile (Fluoreszenzmikroskopie): Vesikel erfahren dieselbe Fokussierung (7) wie Beads vergleichbarer Größe und werden im linken Kanal von der Strömung erfasst (8) (vgl. `nDEP_Vesikel_4x.avi` auf DVD).

an den Enden der Führungselektroden. Wenn auf die Teilchen aufgrund der Frequenz ν des angelegten Feldes NDEP wirkt, werden sie also von diesen Zonen abgestoßen.

In Abb. 6.2A und B wird NDEP durch Anlegen eines $U_{PkPk} = 10$ V Rechteckssignals mit $\nu = 25$ MHz an die Führungselektroden herbeigeführt. Eine größere Menge von ($r_P = 10 \mu\text{m}$)-Beads bewegt sich in Abb. 6.2A auf die Elektroden zu (1). Direkt am Elektrodenende (2) werden die Beads abgestoßen und auf der benachbarten Elektrode gebündelt. Unmittelbar über den Planarelektroden bewegen sich die Beads als Ketten (3) weiter (vgl. `ndep_beads_schnur.mov` auf DVD). Ein Wechsel zwischen den Elektroden ist dabei möglich, wenn die viskose Reibung der Flüssigkeit die NDEP-Kraft übersteigt. Injiziert man in Abb. 6.2B Beads im rechten Kanal (4), so zeigen die Strömungsprofile die Wanderung der Beads über den Elektroden (5) in den linken Kanal. Dort ist die viskose Reibung ausreichend, um die Teilchen mitzuziehen (vgl. `ndep_einzelbeads.mov` auf DVD). Auf diese Weise können die Beads sukzessive transferiert werden (6). Als biologisches Testobjekt werden DOPC-Vesikel von Daniel Steppich eingesetzt (vgl. Abb. 6.2C). Sie bestehen wie Zellen aus einer Lipid-Doppelmembran (hier DOPC), ihr Inneres hingegen ist mit Wasser gefüllt. Die Doppelmembran eines DOPC-Vesikels hat bei Temperaturen des Wassers um $T \approx 14^\circ \text{C}$ bereits den Phasenübergang in die flüssige Phase vollzogen [Steppich05]. Solche Vesikel werden in Abb. 6.2D wie Beads vergleichbarer Größe über den Elektroden fokussiert (7) und propagieren zum linken Kanal, wo sie von der Strömung mitgezogen werden (8) (vgl. `nDEP_Vesikel_4x.avi` auf DVD). Für NDEP mit DOPC-Vesikeln muss ein $U_{PkPk} = 10$ V Rechteckssignal mit $\nu \geq 25$ MHz, bzw. ein harmonisches Signal mit $\nu \geq 70$ MHz angelegt werden. Messungen der dielektrischen Funktion von DMPC-Vesikeln (Doppelmembran ebenfalls in der flüssigen Phase) nach [Schrader01] zeigen eine ausgeprägte Dispersion von $\text{Re}(\varepsilon_{\text{Vesikel}}^*)$ und ein Dissipationsmaximum $\text{Im}(\varepsilon_{\text{Vesikel}}^*)$ bei $\nu \approx 100$ MHz, das durch dielektrische Relaxation der zwitterionischen Kopfgruppe von DMPC verstanden werden kann. Die Phospholipide DOPC und DMPC unterscheiden sich anhand des Verhältnisses (hydrophobe Kettenlänge : Anzahl der Doppelbindungen) wie folgt: DOPC (18:1) und DMPC (14:0) [Steppich05]. Die Kopfgruppen von DOPC und DMPC sind hingegen identisch und führen zur gleichen dielektrischen Relaxation [Kaatze06]. Unsere NDEP-Beobachtungen an DOPC-Vesikeln werden also durch die dielektrische Relaxation der zwitterionischen Kopfgruppe erklärt.

Diese Vorversuche zeigen, dass eine gezielte Umleitung von Teilchen mit NDEP möglich ist. Hierfür muss die Höhe der Flüssigkeitsbahn etwa der Reichweite des NDEP-Effekts nach Abb. 6.1C entsprechen. Dies lässt sich in Kanalstrukturen sicherlich deutlich besser kontrollieren und optimieren als in den hier vorgestellten Bahnen mit freier Oberfläche. Beispielsweise könnte die Kanaldecke metallisiert und geerdet und die Elektrodenabstände verringert werden, um die Signalspannungen herabzusetzen. Als Ziel sollen ausschließlich Objekte ab einer bestimmten Größe oder Art beeinflusst werden. Die Größenselektivität ergibt sich dabei durch die Volumenabhängigkeit r_P^3 der NDEP-Kraft nach Gl. (6.5), die Wahl der gewünschten Teilchensorte durch Ermittlung der Frequenz bei der spezifisch $\text{Re}(f_{CM}) < 0$ gilt.

6.1.3 Abscheidung mit PDEP

In der Bachelorarbeit von Sebastian Frommelt [Frommelt06] wird PDEP verwendet, um einwandige Kohlenstoff-Nanoröhren (*single wall nanotube*, *SWNT*) aus der Lösung abzuscheiden. Durch Ultraschall können SWNT-Agglomerate in einer basischen Lösung (hier SDS) zerlegt werden, sodass einzelne SWNTs vorliegen. Diese besitzen einen Durchmesser von maximal 10 nm und eine maximale Länge im unteren μm -Bereich. Trotz ihres geringen Volumens können sie mittels PDEP an den Elektroden abgeschieden werden, wie wir im folgenden Abschnitt belegen. Der interessante Frequenzbereich für PDEP wurde dazu vorab in dielektrischen Messungen an SWNTs mit Dr. Peter Lunkenheimer und Robert Wehn (beide Experimentalphysik V, Universität Augsburg) eingegrenzt.

Der in Abb. 6.3A skizzierte Chip verfügt über zwei TIDTs (1) zum Durchmischen des Flüssigkeitstropfens, der auf die aktive Fläche (2) pipettiert wird. Darin befinden sich vier Strukturen (3), die mit verschiedenen elektrischen Signalen gespeist werden können. Auf einem solchen Chip kann demnach bei vier verschiedenen Frequenzen PDEP mit SWNTs untersucht werden. Ein hydrophober Bereich (4) verhindert das Abfließen des Tropfens. Wie in Abb. 6.3B skizziert, bestehen die Elektrodenstrukturen aus 32 kammartigen Reihen, die alternierend mit Masse und dem elektrischen Wechselspannungssignal verbunden sind. Dadurch erhält man pro Struktur etwa 10^4 Engstellen im Abstand von circa $1.5 \mu\text{m}$. Simuliert man den Gradienten der Feldintensität $|\nabla E^2|$ (und damit die PDEP-Kraft), so sieht man in Abb. 6.4C, dass dieser in allen Raumrichtungen um die Engstelle um etwa vier Größenordnungen abfällt. Werden durch die Strömung SWNTs in Nähe der Engstelle befördert, so werden sie (bei der richtigen Frequenz ν des Felds, sodass $\text{Re}(f_{CM}(\nu)) > 0$) zum Ort des höchsten Felds in die Engstelle gezogen.

Da die SWNTs zur Beobachtung der Anlagerung im Mikroskop zu klein sind, bedarf es einer alternativen Methode, um beim Betrieb des Chips zu erkennen, ob die aktuelle Frequenz zu einer Deposition der SWNTs durch PDEP führt. Eine Elektrodenstruktur in Abb. 6.3A kann als komplexer planarer Kondensator betrachtet werden, der aufgrund seiner geringen Kapazität eine hohe Impedanz Z_{Kond} besitzt. Der Reflexionsfaktor R nach [Vogel97] beschreibt den Anteil der reflektierten Leistung aufgrund des Impedanzunterschieds zwischen der Struktur und der Signal-Zuführung Z_{Kabel} :

$$R = \left| \frac{Z_{Kabel} - Z_{Kond}}{Z_{Kabel} + Z_{Kond}} \right| \quad (6.6)$$

Infolge der großen Impedanz Z_{Kond} ist $R \approx 1$, und damit wird praktisch die gesamte Leistung am Kondensator reflektiert. Lagern sich nun durch PDEP SWNTs an den Engstellen der Elektroden an, so werden sie bei ausreichender Länge (und falls die aktive Fläche nicht durch eine SiO_2 -Schicht von der Lösung isoliert ist) eine leitfähige Verbindung zwischen den Kammreihen erzeugen. Diese macht sich jeweils elektrisch durch eine SWNT-Impedanz Z_{SWNTi} bemerkbar, die parallel zu Z_{Kond} geschaltet ist (siehe Abb. 6.3D). Dadurch verändert sich i.a. die Impedanz des Kondensators so, dass

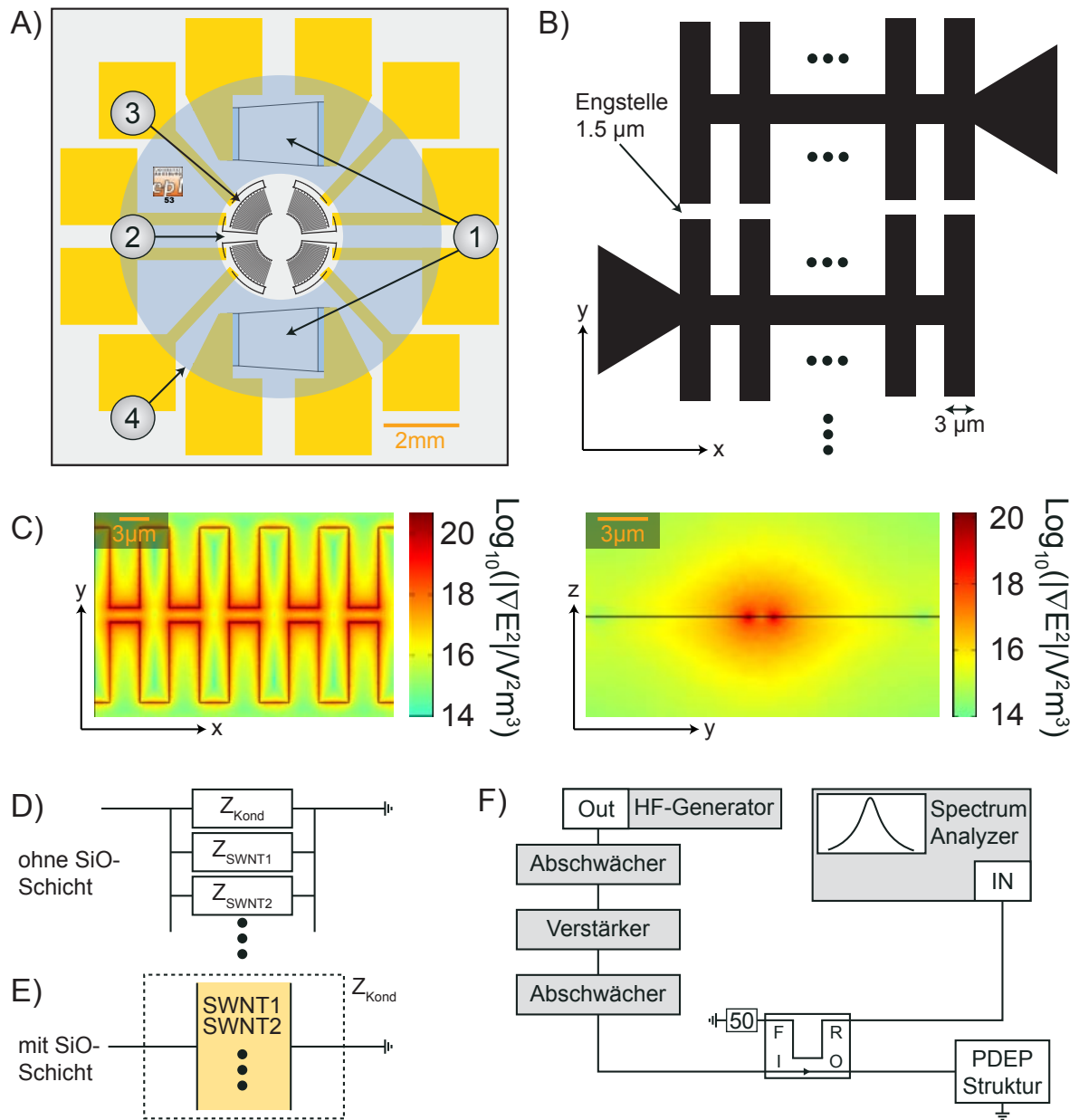


Abbildung 6.3 SWNT-Anlagerung mit PDEP in [Frommelt06]: **(A)** Design (aus der Layoutverwaltung) eines PDEP-Mikrofluidik-Chips zur SWNT-Anlagerung: Mit den TIDTs (1) wird ein Tropfen mit SWNT-SDS-Lösung in der aktiven Fläche (2) gemischt (bergenzt durch hydrophobe SiO-Schutzschicht (4)). Vier Elektrodenstrukturen (3) erlauben die PDEP-Untersuchung bei verschiedenen Frequenzen (Probenfoto im Anhang Abb. B.5D). **(B)** Kammartige Elektrodenstrukturen erzeugen in den Engstellen starke elektrische Felder. **(C)** Um die Engstellen zeigt die Simulation eine Zone mit großem $|\nabla E^2|$ und starker PDEP-Kraft. **(D)** Bei elektrischem Kontakt zwischen Lösung und Elektroden überbrücken angelagerte SWNTs die Elektroden und bilden eine parasitäre Leitfähigkeit. **(E)** Wird der aktive Bereich durch eine SiO-Beschichtung von der Lösung isoliert, gehen die SWNTs in die Polarisierbarkeit des Kondensatorzwischenraums ein. **(F)** Die Impedanzänderung der Elektrodenstruktur durch SWNT-Anlagerung wird anhand der Änderung des reflektierten Signals am Spectrum Analyzer gemessen.

der Reflexionsfaktor sinkt. Wird die aktive Fläche mit einer SiO-Schicht geschützt, so können die SWNTs keine leitfähige Verbindung zwischen den Elektroden schaffen. Da sie jedoch entlang der SWNT-Achse stark polarisierbar sind, wird sich die Polarisierbarkeit des Kondensator-Zwischenraums vergrößern (siehe Abb. 6.3E) und damit die Impedanz des Kondensators verringern. Gleichwohl sinkt der Reflexionsfaktor. Das reflektierte Signal lässt sich im Aufbau von Abb. 6.3F bestimmen. Der Richtkoppler (Minicircuits BDC PDC_10_1BD, vgl. Kapitel 3.1.3) gibt ein Maß für die reflektierte Leistung am Spectrum Analyzer aus, wo diese erfasst und zum Steuerrechner übertragen wird. Für eine Testreihe mit vier verschiedenen Frequenzen wird zunächst mit einem Visual Basic Programm für jede Frequenz die Ausgangsleistung des Generators so eingestellt, dass an der Elektrodenstruktur immer 13 dBm Leistung ($U_{eff} = 1$ V) ankommen. Im Versuch werden dann sequentiell die PDEP-Strukturen angeschlossen und der zeitliche Verlauf des reflektierten Signals in einer Datenbank hinterlegt. Während der langen Messzeiten verhindert die Kühlung des Probenhalters ein Abdampfen des Tropfens. Gleichzeitig gewährleistet die Schaltung aus Abschwächern und Verstärkern, dass der Generator aufgrund der reflektierten Leistung keinen Schaden nimmt.

In [Frommelt06] sind so im zuvor durch dielektrische Messungen an SWNTs abgesteckten, interessanten Frequenzbereich zeitaufgelöste Messungen der SWNT-Anlagerung möglich. Abb. 6.4A zeigt den Abfall der reflektierten Leistung $P_R(t)$ während der Messung und ergibt eine deutlich stärkste Anlagerungsgeschwindigkeit für $f = 20$ MHz. Auch für die mit einer SiO-Schicht isolierten Elektrodenstrukturen kann die Anlagerung problemlos gemessen werden. REM-Aufnahmen der Chips belegen dabei, dass ein stärkerer Abfall der reflektierten Leistung mit vermehrter Anlagerung von SWNTs identifiziert werden kann. In der Übersicht der Messung bei 6 MHz in Abb. 6.4B sind nur wenige SWNTs als helle Fäden in den Engstellen auszumachen (bei den hellen Stellen in den Kammfingern handelt es sich um Aufladungen). Bei 20 MHz in Abb. 6.4C hingegen erkennt man großflächige Abscheidung von SWNTs sowohl in der Übersicht als auch im Detailbild. Darüber hinaus zeigen sich in Bereichen zerstörter Elektroden keine SWNTs, weshalb tatsächlich spezifische Anlagerung durch PDEP vorliegt.

Das Chip-Layout ist somit ideal geeignet zur Messung der PDEP-Abscheidung von SWNTs. Für zukünftige Entwicklungen bleiben folgende Aufgabenstellungen erhalten: Da wie in Abb. 6.4C dargestellt weitreichende Elektrodenbereiche unbrauchbar sein können, sind zur Zeit keine quantitativen Aussagen über die Anzahl an SWNTs in den Engstellen möglich. Hier muss die Probenpräparation noch optimiert werden. Weiterhin muss an zukünftigen Proben Raman-Spektroskopie zur Identifizierung des angelagerten SWNT-Typs durchgeführt werden. Da sich halbleitende und metallische SWNTs in ihrem Polarisationsverhalten unterscheiden, ist die gezielte Abscheidung einer Sorte mit PDEP ein realistisches und lohnenswertes Ziel. Die Suche nach der dafür nötigen Frequenz ν kann wie gezeigt mit diesem Chip-Design erfolgen.

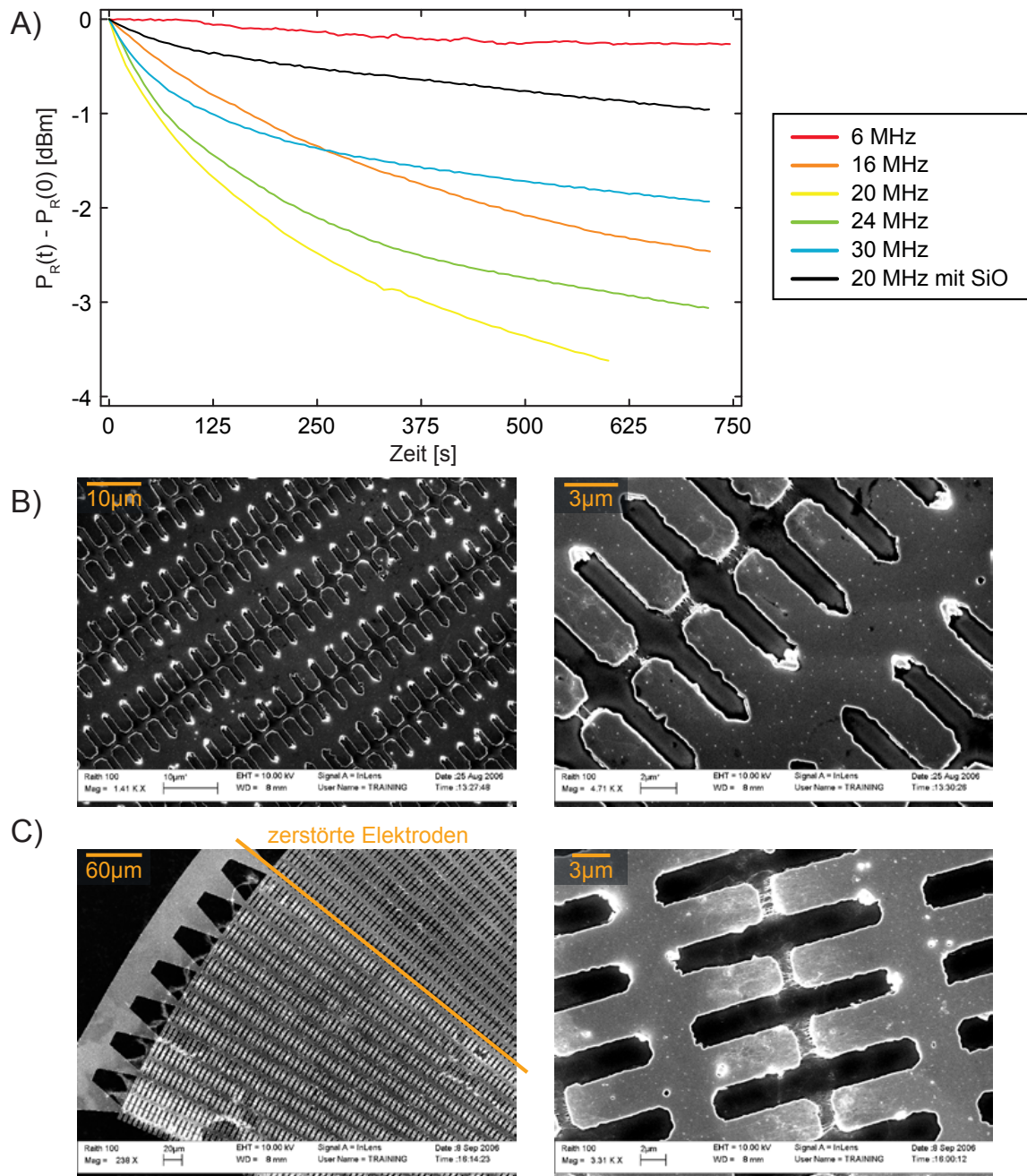


Abbildung 6.4 Ergebnisse in [Frommelt06]: (A) Die zeitliche Messung des reflektierten Signals zeigt die maximale Anlagerungsgeschwindigkeit bei $\nu = 20$ MHz. Auch wenn die aktive Fläche durch eine SiO-Schicht von der Lösung isoliert ist, bleibt die Anlagerung messbar. (B) Bei 6 MHz sind in der Übersicht der Elektroden kaum SWNTs als helle Fäden in den Engstellen erkennbar. Lokal ergibt sich in der Detailansicht eine mäßige Abscheidung. (C) Bei 20 MHz befindet sich eine ausgeprägte Anzahl an SWNTs in den Engstellen. Die Übersicht belegt außerdem, dass in Bereichen mit zerstörten Elektroden keine unspezifische SWNT-Anlagerung stattfindet.

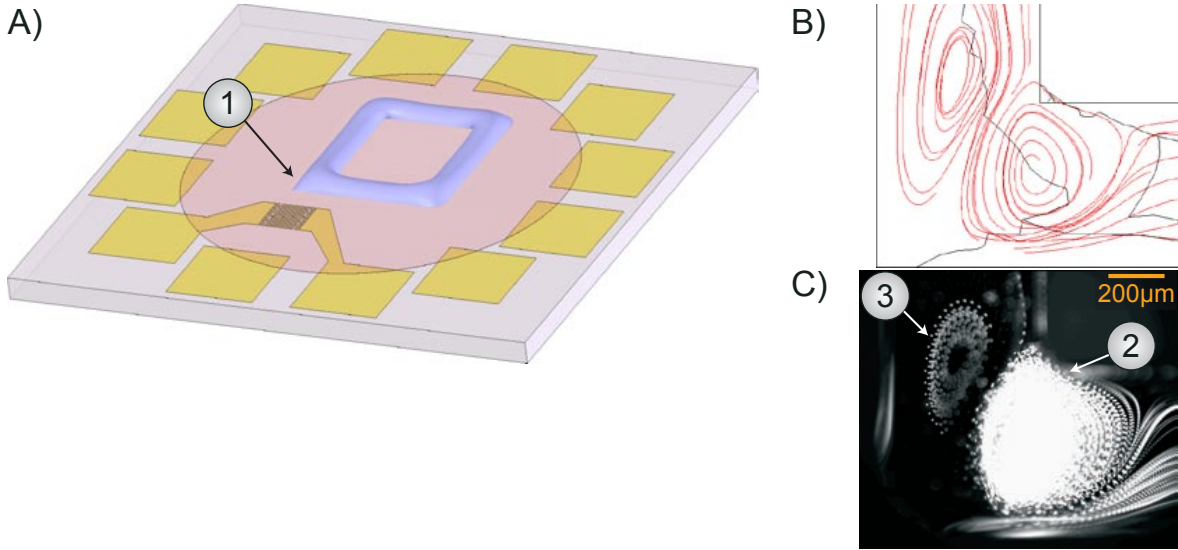


Abbildung 6.5 (A) Auf einem Chip wird das Beispielmmodell aus Kapitel 4.4.1 mit eckiger Kurve (1) umgesetzt. (B) Simulation der Strömungslinien aus Kapitel 4.4.4. (C) Das experimentelle Strömungsprofil zeigt, dass die durch die Simulation bestätigten Wirbel (2) und (3) unterschiedliche Teilchenmengen enthalten.

6.2 Teilchen-Akkumulation in Wirbeln

In diesem Abschnitt wird die Beispiel-Fluidstrecke aus Kapitel 4.4.1 auf dem in Abb. 6.5A dargestellten Chip implementiert. Treibt man die Flüssigkeit in der eckigen Kurve (1) mit dem IDT (Konfiguration IDT1 nach Tab. B.2) an, so wurde bereits in Kapitel 4.4.4 die Strömung in Abb. 6.5B simuliert. Die Strömungslinien des Experiments in Abb. 6.5C stimmen damit gut überein, zeigen aber noch eine zusätzliche Eigenschaft: In Wirbel (2) bewegen sich wesentlich mehr Teilchen als in Wirbel (3). Tatsächlich tritt dieser Effekt besonders stark in solchen rechtwinkligen Kurven auf und kann dort zur Akkumulation verwendet werden.

In [Schindler06] wird eine Erklärung des Akkumulationseffekts anhand von Korrekturen für die Partikel-Advektion versucht:

$$\begin{aligned}
 m\ddot{\vec{R}} &= \vec{F}^{(0)} + \vec{F}^{(1)} \\
 \vec{F}^{(0)} &= -\frac{4\pi}{3}r_P^3\nabla p(\vec{R}) \\
 \vec{F}^{(1)} &= -6\pi\eta r_P(\dot{\vec{R}} - \vec{u}(\vec{R})) + \pi\eta r_P^3\Delta\vec{u}(\vec{R})
 \end{aligned} \tag{6.7}$$

Die Kraft, die auf ein Teilchen mit Radius r_P am Ort \vec{R} wirkt, ist damit nicht nur durch den Stokeschen Reibungsterm $-6\pi\eta r_P(\dot{\vec{R}} - \vec{u}(\vec{R}))$ gegeben. Stattdessen erhält man in erster Ordnung Korrekturen mit r_P^3 , die vom statischen Druckfeld p und der Geschwindigkeit der Flüssigkeit \vec{u} abhängen. Weiterhin beurteilt M. Schindler den Einfluss der beiden Korrekturterme. Hierzu dienen Simulationen der Verzerrung der Oberfläche von Tropfen, die unter dem Einfluss der Acoustic Streaming-Volumenkraft bei hohen SAW-Leistungen nach [Wixforth04A] bewegt werden. Es ergibt sich, dass der

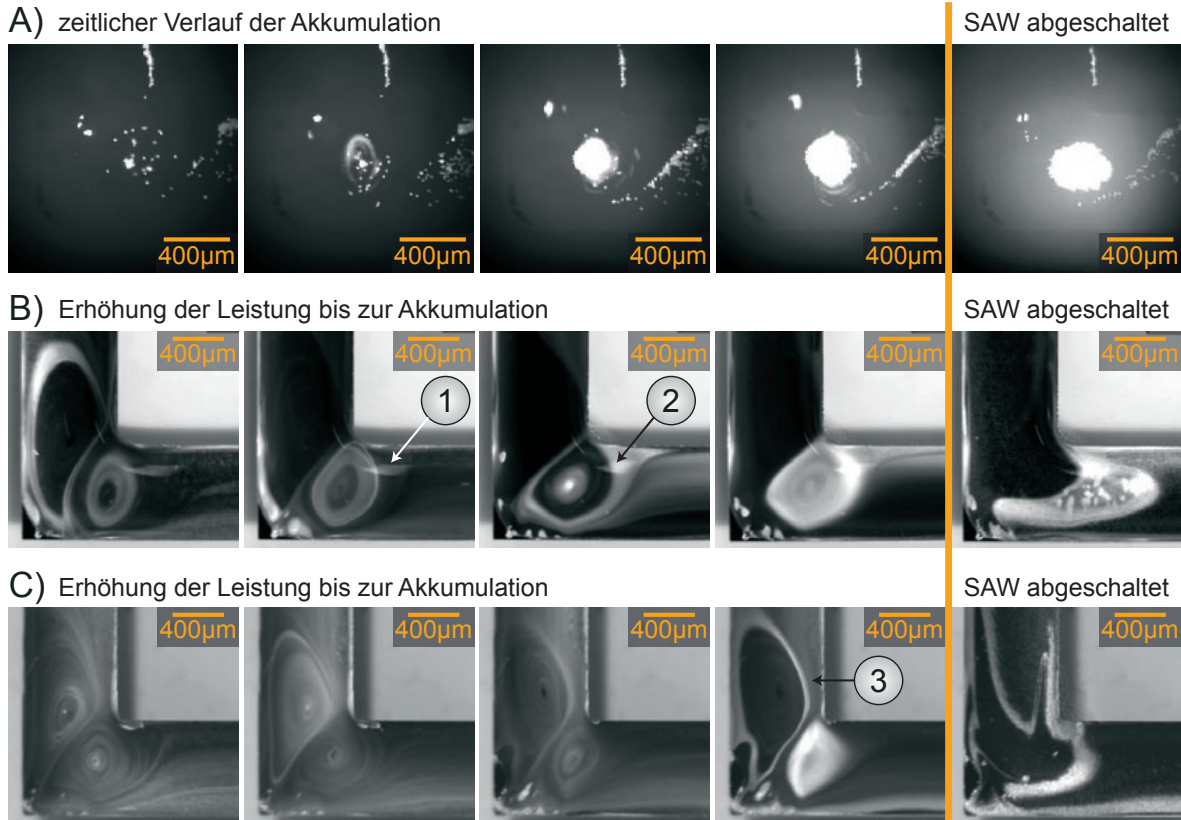


Abbildung 6.6 (A) Zeitlicher Verlauf des Akkumulationsvorgangs für ($r_P = 4.8 \mu\text{m}$)-Beads (vgl. rp4800nm.mov und rp4800nm2.mov auf DVD). (B) Für ($r_P = 0.55 \mu\text{m}$)-Beads wird die Leistung solange erhöht, bis die Akkumulation einsetzt. Dabei treten bereits Verzerrungen der Wasseroberfläche auf (siehe Reflex (1) und (2), vgl. rp550nm.mov auf DVD). (C) Erst bei sehr hohen Leistungen setzt für ($r_P = 0.36 \mu\text{m}$)-Beads mäßige Akkumulation ein, ein großer Teil der Beads passiert aber die Ecke (3) (vgl. rp360nm.mov auf DVD).

konservative Druck-Anteil den viskosen Geschwindigkeits-Anteil der Acoustic Streaming-Volumenkraft in diesem Bereich um mehrere Größenordnungen übersteigen muss, um die beobachtete Verzerrung der Tropfenoberfläche verursachen zu können. Mit der Kenntnis dieses Größenverhältnisses leitet Dr. Michael Schindler (Theoretische Physik I, Universität Augsburg) einen kritischen Radius $r_{P_{krit}} \approx 0.5 \mu\text{m}$ her. Teilchen oberhalb dieser Grenze werden vom statischen Druckfeld des Acoustic Streaming in den Wirbel abgelenkt, darunter werden sie viskos mit der Strömung der Flüssigkeit bewegt und die Akkumulation schwindet. Diese Vorstellung ist mit dem Hintergrund der beobachteten abstoßenden Kräfte auf Beads von Bereichen hoher Acoustic Streaming-Volumenkraft nach Kapitel 4.5.3 einsichtig. Darüber hinaus kann die Abschätzung experimentell bestätigt werden.

Injiziert man ($r_P = 4.8 \mu\text{m}$)-Beads in die Strömung, so zeigt die Bildstrecke Abb. 6.6A den zeitlichen Verlauf der Akkumulation im Wirbel. Bei moderater SAW-Leistung passieren keine Teilchen die Kurve, sondern werden im Wirbel festgehalten. Nachdem die SAW abgeschaltet ist, verbleiben die aufgesammelten Beads an der Stelle des Wirbels. Für geringere Teilchenradien ändert sich dieses Verhalten. In Abb. 6.6B werden

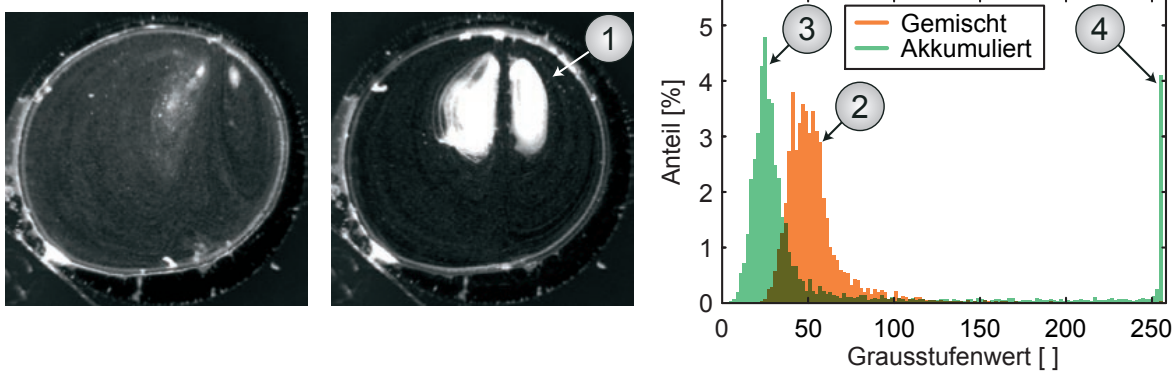


Abbildung 6.7 Im Katenoid lassen sich ebenfalls vormalig verteilte ($r_P = 2.3 \mu\text{m}$)-Beads in (1) akkumulieren (vgl. `akkumulation_katenoid.mov` auf DVD). Die Trennung des gemischten Gebiets (2) in ein entleertes Gebiet (3) und eine Akkumulations-Region (4) erkennt man deutlich im Histogramm der Graustufenwerte.

($r_P = 0.55 \mu\text{m}$)-Beads eingesetzt und im linken Bild bei moderater SAW-Leistung betrieben. Es bestehen zwar Regionen erhöhter Teilchendichte, sie werden aber nicht im Wirbel punktuell akkumuliert. Erhöht man jetzt in der Bildstrecke schrittweise die Leistung, so setzt die Akkumulation erst bei Leistungen ein, die bereits die Wasseroberfläche verzerren. Dies wird deutlich an der Änderung des Reflexes (1) zu (2) auf der Oberfläche. Sobald die SAW im rechten Bild abgeschaltet wird, werden die Teilchen durch ihre Trägheit geringfügig verteilt. Man betreibt das System also bei relativ großer Reynolds-Zahl. Wird der Bead-Radius in Abb. 6.6C auf $r_P = 0.36 \mu\text{m}$ verringert, so kann erneut bei moderaten Leistungen keine Akkumulation festgestellt werden. Erst bei sehr hohen Leistungen setzt Akkumulation ein, die aber von einer steten Verlustströmung (3) begleitet wird. Die Trägheit verteilt beim Abschalten der SAW die geringe, akkumulierte Bead-Menge um die Wirbelposition. Die hier eingesetzte SAW-Leistung ist ausreichend, um die Oberfläche stark zu verzerren und das gesamte Volumen zu bewegen, weshalb eine weitere Erhöhung nicht möglich ist. Damit kann die vordefinierte Benetzung der Ecke nicht aufrecht erhalten werden und die Randbedingungen sind nicht reproduzierbar. Man befindet sich also in dem von M. Schindler für die Abschätzung von r_{Pkrit} angenommenen Parameterbereich. Die deutliche Minderung der Akkumulationseigenschaften gegenüber Abb. 6.6B bestätigt Existenz und Größe des kritischen Radius $r_{Pkrit} \approx 0.5 \mu\text{m}$ für Akkumulationsexperimente in Wirbeln mit freien Oberflächen.

Darüber hinaus lässt sich die Akkumulation aber auch im Katenoid-förmigen Wasservolumen herbeiführen. Für ($r_P = 2.3 \mu\text{m}$)-Beads zeigt Abb. 6.7, dass eine Erhöhung der SAW-Leistung in einem vormalig gemischten Gebiet zu einer starken Akkumulation in (1) führt. Noch besser erkennt man die deutliche Akkumulation im Histogramm der Graustufenwerte, wo die Verteilung um einen Graustufenwert (2) für das gemischte Gebiet in einen entleerten Bereich (3) und den Akkumulationsbereich (4) überführt wird. Als Nachteil erweist sich jedoch, dass der Effekt im Katenoid-förmigen Wasservolumen nicht ähnlich reproduzierbar wie in der Kurvengeometrie ist.

Die beobachteten Effekte können in Fluidik-Bahnen mit freien Oberflächen zur Akkumulation von Teilchen mit Radien $> 0.5 \mu\text{m}$ verwendet werden. Dies ist insbesondere wichtig für Labs-on-a-chip, um auf dem Chip verarbeitete Produkte mit Pipettierrobotern an definierten Orten extrahieren zu können. In Geometrien ohne freie Oberflächen lässt sich die Akkumulation ebenfalls herbeiführen, bedarf dann für die Anwendung aber zusätzlicher Anschlüsse zur Extrahierung der Produkte. Als weiteres Projekt bietet sich die genaue Untersuchung des Zusammenhangs zwischen der SAW-Leistung und der Größe der akkumulierten Beads an. Auf Basis dieser Relation können durch Anlegen einer SAW-Leistung dann Teilchen gesammelt werden, deren Radius einen gewünschten Schwellwert überschreitet.

6.3 Zusammenfassung

Dieses Kapitel befasste sich mit Machbarkeitseinschätzungen einiger Sortieransätze auf Labs-on-a-Chip, die mit SAW-Fluidik betrieben werden. Auf Teilchen ohne Ladung und permanentes Dipolmoment kann im externen elektrischen Wechselfeld aufgrund der induzierten Polarisierung im zeitlichen Mittel eine Kraft wirken. Im ersten Teil lag der Fokus auf dem Einsatz dieser dielektrophoretischen Kräfte.

Zunächst wurde eine Umleitung konstruiert, die ($r_P = 10 \mu\text{m}$)-Beads und DOPC-Vesikel (als biologische Testobjekte mit vergleichbarer Größe) entgegen der viskosen Reibungskräfte der Strömung (Reynolds-Zahl $Re \approx 0.03$ [Purcell77]) zwischen zwei kreisförmigen Kanälen umleiten kann. Hierzu verwendeten wir interdigitale Elektroden, die eine abstoßende negative dielektrophoretische Kraft erzeugen und so die Objekte überführen. Die Kraft tritt erst bei ausreichend hohen Frequenzen ab ca. 70 MHz auf. Dort relaxiert die Polarisierbarkeit der Objekte gegenüber der bei diesen Frequenzen konstanten Polarisierbarkeit des umgebenden Wassers [Schrader01].

Weiterhin wurden attraktive positive dielektrophoretische Kräfte in der Bachelorarbeit von Sebastian Frommelt [Frommelt06] eingesetzt, um einwandige Kohlenstoff-Nanoröhren (SWNT) aus der Strömung (Lösung aus SDS und SWNTs) auf Elektroden abzuscheiden. Dazu wurde zunächst in dielektrischen Messungen an SWNTs mit Dr. Peter Lunkenheimer und Robert Wehn ein interessanter Frequenzbereich eingegrenzt. In diesem Bereich wurde für verschiedene Frequenzen des externen elektrischen Felds die Anlagerung der SWNTs in den Elektrodenstrukturen gemessen. Hierzu wurde die von der Elektrodenstruktur reflektierte Leistung des HF-Signals aufgezeichnet, die ein Maß für die Menge angelagerter SWNTs darstellt. Auf diese Weise konnte (bei gleicher Spannung) die Frequenz des Wechselfelds, die eine maximale Anlagerungsgeschwindigkeit bewirkt, zu 20 MHz bestimmt werden. Diese Interpretation der Reflexionsmessungen konnten wir qualitativ anhand der Menge angelagerter SWNTs in REM-Bilder belegen.

Im letzten Teil wurde eine neuartige Technik zur Akkumulation von Teilchen in Wirbeln vorgestellt. Bei der Einkopplung der SAW in Kurven kommt es zu verstärkter

Akkumulation von Teilchen in einem der beiden erzeugten Wirbel. Bereits bei der Simulation solcher rechtwinkliger Kurven in Kapitel 4.5.3 konnten zusätzliche repulsive Kräfte auf die Beads wahrgenommen werden. Die Interpretation, wonach die Teilchen vom stationären Druck-Feld des Acoustic Streaming abgestoßen werden, ist die Basis für eine Abschätzung von Michael Schindler in [Schindler06]. Seine Berechnungen unter Verwendung von Korrekturtermen zur Advektion ausgedehnter Teilchen nach Faxén prophezeien einen kritischen Radius $r_{P_{krit}} = 0.5 \mu\text{m}$. Unterhalb dieses Radius sind die Druckkräfte auf Teilchen zu gering, um sie gegen die viskose Reibung der Strömung in den Wirbel zu stoßen. Im Experiment wurde diese Schätzung bestätigt und gleichzeitig aufgezeigt, dass zur Akkumulation kleinerer Teilchengrößen höhere SAW-Leistungen vonnöten sind. Dadurch eröffnet diese Geometrie die Möglichkeit größenselektiver Akkumulation. Außerdem kann die Akkumulation auch in abgedeckten Fluid-Reservoirs wie z.B. dem Katenoid-förmigen Fluid-Reservoir erfolgen.

Kapitel 7

Zusammenfassung und Ausblick

Diese Arbeit führte die Entwicklung von Labs-on-a-chip weiter, auf denen die Flüssigkeit mit Acoustic Streaming angetrieben wird. Dazu wurde in theoretischer Hinsicht die SAW-Raytracing-Simulation zur Berechnung von 3d-Strömungsprofilen des durch Oberflächenwellen (SAW) induzierten Acoustic Streaming konzeptioniert und umgesetzt. Der experimentelle Teil der Arbeit beschäftigt sich mit dem Mischen mikrofluidischer Systeme durch chaotische Advektion, der Sortierung mit Dielektrophorese und der größenselektiven Akkumulation in Kurvenwirbeln.

7.1 Die SAW-Raytracing-Simulation

Die Simulation des Acoustic Streaming ist ein anspruchsvolles Multiskalenproblem. Unseren Abschätzungen zufolge übersteigt die zeitabhängige Lösung der kompressiblen Navier-Stokes-Gleichung mit anschließender Berechnung des Acoustic Streaming durch Zeitmittelung [Köster06A] in drei Dimensionen sowohl die Speicher- als auch die Rechenkapazität heutiger Einzelplatzsysteme um einen Faktor > 100 . Deshalb wurde zunächst in Kapitel 4 ein neues Konzept zur umfassenden Simulation der SAW-Fluidik von der Anregung der SAW durch den IDT bis zu den Strömungsprofilen der Fluidik in beliebig geformten 3d-Geometrien erarbeitet. Hierbei wurde die aufwändige Simulation der Akustik von Schallwellen im Wasser durch ein Raytracing mit einem modellierten Ansatz für die Acoustic Streaming-Volumenkraft ersetzt. Sowohl das Modell als auch die benötigten Parameter für Simulationen wurden anhand von Experimenten und der Literatur verifiziert. Mit der SAW-Raytracing-Simulation konnten so die Strömungsprofile in einem abgedeckten Fluid-Reservoir in der Form eines Katenoids präzise im Rahmen der Unsicherheiten experimenteller Randbedingungen simuliert werden. Im freien Tropfen zeigte sich, dass die experimentellen Strömungsprofile für freie Fluid-Reservoirs aufgrund optischer Brechung an den gekrümmten freien Oberflächen Abweichungen von der Simulation zeigen müssen (Katenoid- und Tropfen-Experimente von Daniel Gogel [Gogel06]). Bei der Simulation von Strömungen in Kurven typischer Fluidik-Bahnen wurden diese Effekte minimiert und so erneut die Entstehung der Strömungsprofile genau verstanden. Außerdem konnte der Einfluss des Acoustic

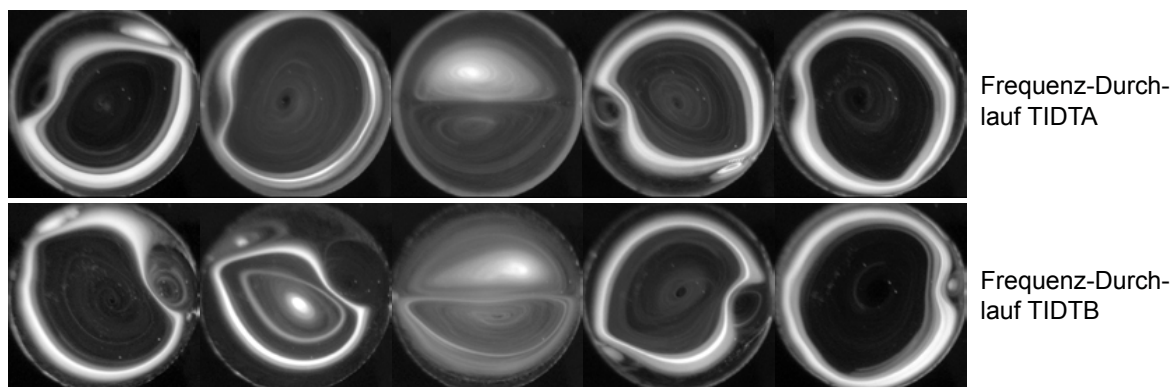


Abbildung 7.1 SAW-Fluidik bei hohen Fluidgeschwindigkeiten: Durch Variation der Frequenz an den TIDTs (Chip nach Aufbau Abb. 4.21) werden unterschiedliche Strömungen erzeugt (vgl. wirbeluhr.mov auf DVD).

Streaming auf ausgedehnte Teilchen in Form repulsiver Kräfte von Bereichen hoher Acoustic Streaming-Volumenkraft beobachtet werden.

Darüber hinaus bietet die SAW-Raytracing-Simulation Raum für neue Entwicklungen. Im Bereich Messtechnik wäre eine Auswertung der $1/e$ -Abklinglänge der SAW-Intensität über einen größeren Frequenzbereich durchzuführen. Davon könnten Aussagen über die Frequenzstabilität des Korrekturfaktors in Gl. (4.41) abgeleitet werden. Dabei gilt es nur im Versuchsaufbau von Abb. 4.7 IDTs durch TIDTs zu ersetzen, sodass auf einem Chip ein größerer Frequenzbereich abgedeckt werden kann.

Bei der Berechnung der Schallpfad-Profile der SAW-Intensität gibt es in [Visintini90] noch interessante Fernfeldapproximationen, deren Implementierung die Berechnung der Schallpfad-Profile von momentan etwa 30 min für die aufwändigen TIDTs um einen Faktor > 10 verkürzen würde.

Das Raytracing ist aktuell auf Totalreflexion an den Grenzflächen beschränkt, im Surface Evolver können Gebieten aber benutzerdefinierte Eigenschaften wie die akustische Impedanz zugewiesen werden. Somit können Schichtsysteme mit arbiträrem Aufbau erzeugt und simuliert werden, indem die Reflexions-/Transmissionscharakteristik beim Raytracing an der Grenzfläche angepasst wird.

Der Bereich Mikrofluidik eröffnet aber die meisten Tätigkeitsfelder. Beispielsweise sollte sich die Variation der $1/e$ -Abklinglänge im Wasser mit der Frequenz und der Temperatur in veränderten Strömungsprofilen äußern. Um Einflüsse von Reflexionen zu minimieren, sollten Experimente dazu im Aufbau nach Abb. 4.3 unter Verwendung eines TIDTs erfolgen. Das Problem der Brechung beim Vergleich Experiment-Simulation an freien Oberflächen (siehe Kapitel 4.5.2) lässt sich umgehen, wenn der Aufbau auf ein inverses Fluoreszenzmikroskop mit Polarisationsfilter transferiert wird. Dieses betrachtet die Fluidik von unten durch das doppelbrechende LiNbO_3 -Substrat und wird deshalb nicht durch Brechung an den freien Grenzflächen beeinflusst. Weiterhin wären Tests notwendig, um zu prüfen, inwiefern die Einführung der Navier-Stokes-Gleichung eine Behandlung von Experimenten zulässt, die bei hohen Fluid-Geschwindigkeiten statt-

finden. In Abb. 7.1 sind solche unterschiedlichen Strömungsprofile dargestellt, die im freien Tropfen (Chip nach Aufbau Abb. 4.21) entstehen, wenn die Frequenz an einem TIDT wie in Kapitel 4.5.2 durchgestimmt wird (vgl. wirbeluhr.mov auf DVD).

Für industrielle Aufgaben empfiehlt sich die SAW-Raytracing-Simulation, weil bei den zur Lösung notwendigen Rechenzeiten durchaus Optimierung betrieben werden kann. Hierzu sollte dann aber zusätzlich die Fluidik mit akustischen Volumenwellen (z.B. mit LiNbO_3 Y-Cut) integriert werden.

7.2 Mischen mit chaotischer Advektion

Im Bereich der experimentellen Mikrofluidik konnte in Kapitel 5 die von H. Aref [Aref84] vorgestellte chaotische Advektion in Simulation und Experiment als Grundlage für effiziente Mischer bewiesen werden. Dazu wurde ein System vorgestellt, in dem mit Diffusion keine Homogenisierung unter $5 \cdot 10^5$ s herbeigeführt wird und Turbulenzen aufgrund der geringen Reynolds-Zahl $Re \approx 0.07$ verschwinden. In diesem unerforschten Bereich [Nguyen04] kann die Effizienz der chaotischen Advektion unabhängig von sekundären Mischeffekten wie Turbulenz und Diffusion betrachtet werden. Die Mischungsqualität quantifizierten wir dabei anhand des als Mischindikator eingeführten inversen Variationskoeffizienten ICV.

Bei der Realisierung der chaotischen Advektion implementierten wir Arefs ursprüngliche Idee zeitlich modulierter Strömungsprofile mit Wirbeln. Es war uns möglich durch ein zeitlich konstantes und ein räumlich entferntes, zeitlich modulierte Strömungsprofil im sog. Dual-Modus chaotische Advektion zu erreichen. Die optimale Modulationsfrequenz wurde dabei im Experiment bestimmt und durch eine 2d-Simulation der Teilchen-Advektion von Dr. Marcin Kostur auf 10% genau bestätigt. Weiterhin generierten wir durch Überlagerung zeitlich modulierter, phasenverschobener Strömungsprofile an einem Ort ein einzelnes, schwenkendes Strömungsprofil. Diese Konfiguration zeigte eine alternative Realisierung der chaotischen Advektion mit vergleichbarer Mischungsqualität wie im Dual-Modus. In beiden Fällen stellte sich eine hervorragende Mischungsqualität in wenigen hundert Sekunden ein, was die Leistungsfähigkeit der chaotischen Advektion hervorhebt. Gleichzeitig ist das System deterministisch und die erwarteten Synergien zwischen theoretischer Simulation und Experiment [Ottino04A] konnten in der Arbeit unterstrichen werden. Ausgehend vom untersuchten System ohne sekundäre Mischeffekte bietet sich selbstverständlich der Transfer in andere Regimes mikrofluidischen Mischens an.

Weiterhin sind die entwickelten Elemente dieser Arbeit Grundlage zur Weiterentwicklung des Mischens mit chaotischer Advektion. Für ein gegebenes Fluid-Reservoir ermittelt die SAW-Raytracing-Simulation geeignete 3d-Strömungsprofile, die sich durch Kreuzung der Strömungslinien auszeichnen. Diese könnten beispielsweise durch Einbau künstlicher Reflektorflächen für die Schallwellen im Fluid-Reservoir gezielt manipuliert werden. Eine erweiterte Simulation der Teilchen-Advektion in drei Dimensionen erhöht

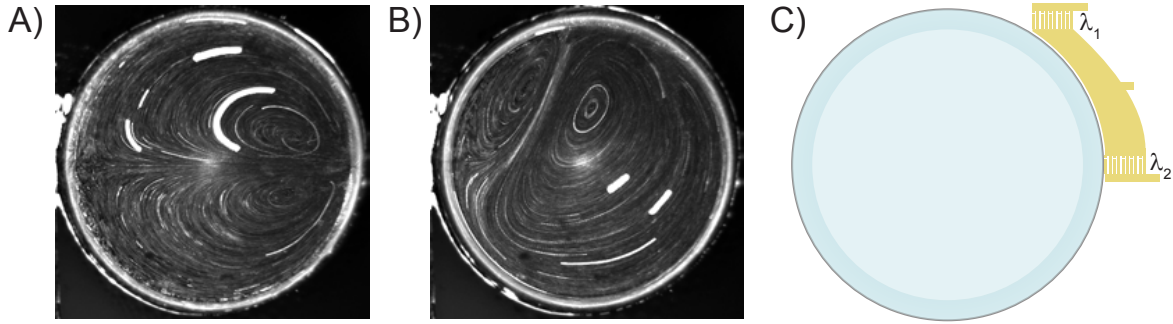


Abbildung 7.2 Zwei Strömungsprofile (A) und (B) eignen sich zum Mischen mit chaotischer Advektion aufgrund der starken Kreuzung von Strömungslinien. (C) Die Anregung der Strömungsprofile kann technisch einfach durch zwei IDTs unterschiedlicher Wellenlänge λ_1 und λ_2 erfolgen.

zwar den Rechenaufwand um 50% (gegenüber der 2d-Simulation), ist aber in der Lage, präzisere Vorhersagen für die optimalen Modulationsfrequenzen zu treffen. Dieses Konzept erlaubt die Optimierung der chaotischen Advektion in arbiträren 3d-Geometrien am Rechner.

Das Beispiel des Katenoid-förmigen Fluid-Reservoir ist dabei den typischen Größenverhältnissen von DNA-Microarrays oder Mikroreaktoren sehr ähnlich. Durch den vorgegebenen Meniskus gibt es bereits zwei Strömungsprofile (Abb. 7.2A und B von Daniel Gogel) mit ausreichender Kreuzung der Strömungslinien. Auch in anderen Geometrien ließen sich durch künstliche Reflektorflächen diese beiden Strömungsprofile einfach mit zwei normalen IDTs wie in Abb. 7.2C erzeugen. Wählt man für beide IDTs verschiedene Wellenlängen λ_1 und λ_2 , so könnten sie mit der selben Zuleitung verbunden, aber durch die unterschiedliche Resonanzfrequenz einzeln aktiviert werden. Es müssen deshalb extern lediglich die beiden Frequenzen angeregt und zeitgesteuert auf den Chip gegeben werden, was technisch unkritisch ist. Alternativ können auch zwei Frequenzen an einen TIDT angelegt werden (vgl. 2frequ.mov auf DVD). Die optimalen Schaltzeiten werden in der SAW-Raytracing-Simulation und der 3d-Simulation der Advektion abgeleitet.

7.3 Sortieren in der SAW-Fluidik

Zuletzt wurden in Kapitel 6 für einige Sortieranwendungen Machbarkeitsstudien ausgeführt. Auf Basis negativer Dielektrophorese wurde so eine Umleitung aus interdigitalen Elektroden entwickelt, die ($r_P = 10 \mu\text{m}$)-Beads und DOPC-Vesikel gegen die viskosen Reibungskräfte bei kleiner Reynolds-Zahl $Re \approx 0.03$ [Purcell77] zwischen zwei kreisförmigen Kanälen überführte. Dazu ist ein harmonisches Wechselfeld mit einer Frequenz $\geq 70 \text{ MHz}$ anzulegen, bei dem die Polarisierung der umzuleitenden Objekte im Vergleich zu Wasser relaxiert. Dieses Konzept kann prinzipiell aufgrund der Volumenabhängigkeit der dielektrophoretischen Kräfte in weiteren Optimierungen größenselektiv gestaltet werden.

Die positive Dielektrophorese konnte im Rahmen der Bachelorarbeit [Frommelt06] von Sebastian Frommelt zur Abscheidung von einwandigen Kohlenstoff-Nanoröhren

(SWNT) in einer konzipierten Elektrodenstruktur verwendet werden. Dazu wurde zunächst der Frequenzbereich, bei dem Dielektrophorese auftreten kann, durch dielektrische Messungen an SWNTs mit Dr. Peter Lunkenheimer und Robert Wehn eingegrenzt. In diesem Bereich erfassten wir für einen Satz von Frequenzen die Anlagerung der SWNTs. Diese verursachen eine Impedanzänderung der Elektrodenstruktur, die anhand einer Absenkung der an den Elektroden reflektierten Leistung aufgezeichnet wurde. So bewirkte eine Frequenz von 20 MHz im Vergleich die höchste Anlagerungsgeschwindigkeit, die auch durch REM-Bilder der abgeschiedenen SWNT-Menge qualitativ bestätigt wurde. Prinzipiell lassen sich durch Anlegen spezifischer Frequenzen selektiv leitende oder halbleitende SWNTs auf diesem Mikrofluidik-Chip anlagern. In weiterführenden Experimenten wollen wir durch Raman-Spektroskopie den Typ angelagerter SWNTs bestimmen, um dann die relevanten Frequenzen in Experimenten abzuleiten.

Zuletzt konnten die angesprochenen repulsiven Kräfte auf ausgedehnte Teilchen von Zonen großer Acoustic Streaming-Volumenkraft eingesetzt werden, um Teilchen im Wirbel einer rechtwinkligen Kurve zu akkumulieren. Abschätzungen von Dr. Michael Schindler auf Basis der Korrekturen zur Teilchen-Advektion nach Faxén prophezeien einen kritischen Radius $r_{Pkrit} \approx 0.5 \mu\text{m}$ für den Akkumulationseffekt. Kleinere Teilchen werden vom Druck nicht in den Wirbel gestoßen, sondern von den viskosen Reibungskräften der Strömung mitgezogen, sodass die Akkumulation schwindet. Diese Abschätzung konnte im Experiment bestätigt und weiter ergänzt werden. Zur effizienten Akkumulation einer bestimmten Teilchengröße bedurfte es einer Mindestleistung der SAW. So soll in weiteren Experimenten die größenselektive Akkumulation von Teilchen in Wirbeln in Abhängigkeit von der SAW-Leistung untersucht werden. Die Akkumulation von Teilchen in Wirbeln kann in der Anwendung von großer Hilfe sein. Die von Pipettier-Robotern auf dem Lab-on-a-Chip abgesetzten Objekte müssen gegebenenfalls nach erfolgreicher Behandlung extrahiert oder transferiert werden. Die Akkumulation in Wirbeln kann so Stellen definieren, an denen Roboter gezielt Material ab einer bestimmten Größe entnehmen können.

Anhang A

Herleitungen und Beschreibungen

A.1 Dielektrische Oberflächenkonstante und spezifische Feldadmittanz

Zur Berechnung der dielektrischen Oberflächenkonstante ε_p wird [Datta86] herangezogen:

$$\varepsilon_p = (\epsilon_{ll} \epsilon_{tt} - \epsilon_{tl})^{0.5} \quad (\text{A.1})$$

Dabei bezeichnen l und t die Indizes der longitudinalen und transversalen Schwingungskomponenten. Wie in [Kutschera03] angegeben ist es notwendig, eine Achsentransformation für LiNbO₃ 128° rot Y-Cut durchzuführen:

$$\varepsilon_{trans} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \Theta & -\sin \Theta \\ 0 & \sin \Theta & \cos \Theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \Theta & \sin \Theta \\ 0 & -\sin \Theta & \cos \Theta \end{pmatrix} \quad (\text{A.2})$$

Den Winkel Θ erhält man aus dem Rotationswinkel des Substrats $\alpha = 128^\circ$ durch $\Theta = \alpha - 90^\circ$. Der Grund für die erneute Berechnung von ε_p liegt in der Frequenzabhängigkeit des dielektrischen Tensors [Tomeno01]. Für Frequenzen unterhalb 100 kHz folgt die Kristallverzerrung dem elektrischen Feld und man erhält ε_p^T bei konstanter Spannung (T für *tension*). Für Frequenzen oberhalb von 10 MHz folgt die Verzerrung dem elektrischen Feld nicht mehr, weshalb hier ε_p^S bei konstanter Verzerrung (S für *strain*) berechnet wird. Bei starken Piezoelektrika wie LiNbO₃ bewirkt der Unterschied im dielektrischen Tensor zwischen ϵ_{ij}^T und ϵ_{ij}^S deutliche Differenzen von ε_p^T und ε_p^S .

Mit den beiden Tensoren

$$\epsilon_{ij}^S = \begin{pmatrix} \epsilon_{11}^S & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_{11}^S & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{33}^S \end{pmatrix} \quad (\text{A.3})$$

$$\epsilon_{ij}^T = \begin{pmatrix} \epsilon_{11}^T & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_{11}^T & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{33}^T \end{pmatrix} \quad (\text{A.4})$$

Nr	Frequenz / Methode	dielektrischer Tensor			
		$\epsilon_{11}^T [\epsilon_0]$	$\epsilon_{33}^T [\epsilon_0]$	$\epsilon_{11}^S [\epsilon_0]$	$\epsilon_{33}^S [\epsilon_0]$
1	100 kHz	84.6	29.1		
2	10 MHz			44.3	27.6
3	0.1 GHz			44.1	23
4	1 GHz			43.9	23.7
5	9 GHz			42.5	26
6	IR			41.5	44
7	Raman			26.0	29
8	Brillouin+Fit			44.5 ± 0.5	27.5 ± 0.5

Tabelle A.1 Die Einträge des dielektrischen Tensors variieren mit der Frequenz (1-7 [Tomeno01], 8 [Lim03]).

kann man $\epsilon_p^{T/S}$ und die spezifische Admittanz $y_0^{T/S}$ aus den Werten in Tab. A.1 errechnen. Die Daten Nr. 1 – 7 aus einer Übersicht in [Tomeno01] zeigen deutlich die Frequenzabhängigkeit. Bei den Daten Nr. 8 aus [Lim03] wurden ϵ_{ij} , p_{ij} und c_{ij} bestimmt, indem theoretische Modelle simultan an Brillouin-Streuungs-Messungen für die Schnitte Cut = X und Cut = Y gefittet wurden. Damit stellen sie einen homogenen Datensatz dar, allerdings nur für konstante Verzerrung ϵ_p^S .

Problematisch ist die Einschätzung von [Datta86], dass aufgrund von Details der Herleitung selbst in den höherfrequenten Bereichen ϵ_p^T die experimentellen Ergebnisse besser nachvollzieht. Gerade in unseren Arbeitsbereich zwischen 120 MHz und 180 MHz ist unklar, welche Größen heranzuziehen sind. In Abb. A.1 beträgt damit die Unsicherheit für y_0 bis zu einem Faktor 2 und lässt nur Abschätzungen der SAW-Amplituden nach Kapitel 2.10 zu. Gleiches gilt für ϵ_p und die Simulation von Schallpfad-Profilen nach 4.4.2. Die Zusammenhänge dieses Abschnitts sind Voraussetzung für die Berechnung der Funktionen $\epsilon_p^T(\theta)$ und $\epsilon_p^S(\theta)$ in Anhang B.3 mit den Datensätzen 1 und 8.

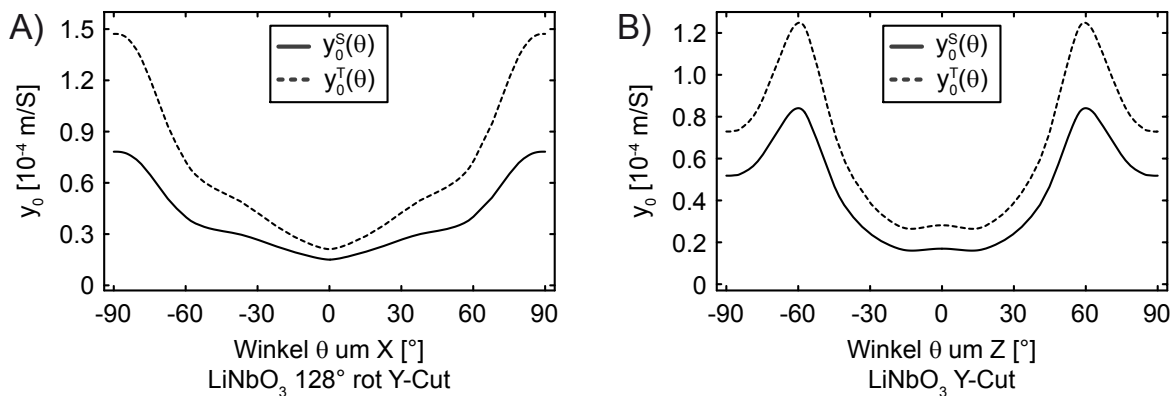


Abbildung A.1 Spezifische Feldadmittanz für folgende Schnitte: **(A)** LiNbO₃ 128° rot Y-Cut (Winkel ($\theta = 0^\circ$) = X-Richtung), **(B)** LiNbO₃ Y-Cut (Winkel ($\theta = 0^\circ$) = Z-Richtung).

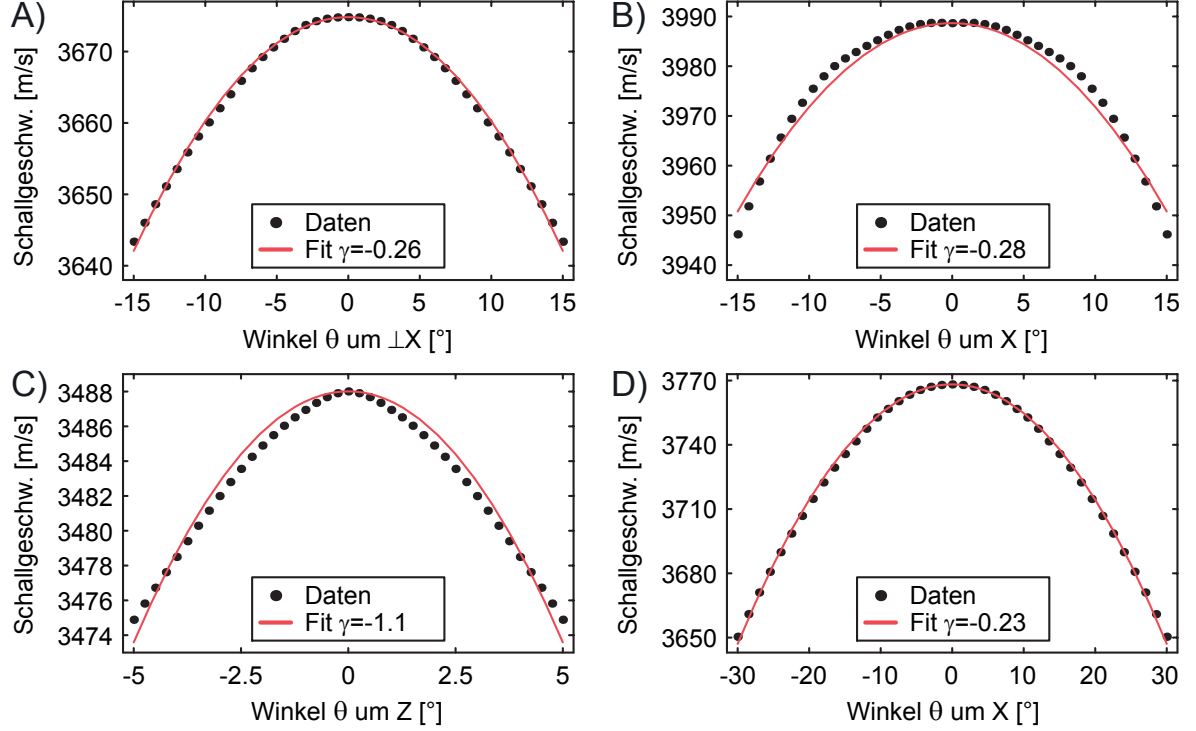


Abbildung A.2 Die parabolische Approximation der Schallgeschwindigkeit ist für die hier betrachteten Schnitte nur in kleinen Winkelbereichen möglich: LiNbO₃ 128° rot Y-Cut (A) \perp X-Richtung, (B) X-Richtung. LiNbO₃ Y-Cut (C) Z-Richtung, (D) X-Richtung.

A.2 Parabolische Approximation der Schallgeschwindigkeit

Wenn Berechnungen für die Oberflächenwellen auf einem bestimmten Schnitt eines Piezoelektrikums angestellt werden sollen, wird zunächst geprüft, ob die richtungsabhängige Schallgeschwindigkeit wie folgt parabolisch approximiert werden kann [Oliner73].

$$v_{SAW}(\theta) = v_{SAW}^{\theta=0} \left(1 + \frac{\gamma}{2} \theta^2 \right) \quad (\text{A.5})$$

Diese Approximation vereinfacht die Rechnungen und verringert den numerischen Aufwand enorm [Streibl00].

Für die betrachteten Schnitte zeigt sich jedoch, dass die parabolische Approximation nur in einem geringen Winkelbereich $\Delta\theta$ gültig ist (vgl. Abb. A.2). Insbesondere die wichtigen Rayleigh-Wellen-Richtungen X auf LiNbO₃ 128° rot Y-Cut (Abb. A.2B) und Z auf LiNbO₃ Y-Cut (Abb. A.2C) lassen sich nur ungenügend approximieren. Für größere Bereiche weicht der Verlauf der Schallgeschwindigkeit stark von der Parabel ab (siehe auch [Laude04]). Der Winkel θ wird um die jeweilige Ausbreitungsrichtung gemessen, deren Bezeichnungen in Abb. 2.2C definiert sind. Aus den entsprechenden parabolischen Approximationen lässt sich der Parameter γ bestimmen.

A.3 Die Ladungsdichte einer Überlappung

Um die Berechnungen von SAW-Schallpfad-Profilen zu beschleunigen, soll hier die Ladungsträgerdichte auf den Elektroden bestimmt werden. Im eindimensionalen Fall ist die elektrostatische Lösung eines unendlich langen IDTs nach [Engan69]:

$$\sigma_{inf}(x) = \frac{k_{IDT} V \varepsilon_p^S}{K [\cos(\mu \pi/2)]} \sum_{n=1}^{\infty} P_{n-1} [\cos(\mu \pi)] \sin[(2n-1) k_{IDT} x] \quad (A.6)$$

Hier bezeichnet V die angelegte Spannung, ε_p^S die dielektrische Oberflächenkonstante, μ die Breite der Elektroden, gemessen in Einheiten von $\lambda/2$, und k_{IDT} den Wellenvektor zur Elektrodenperiode λ . Außerdem ist K das vollständige elliptische Integral 1. Gattung und P_n das n -te Legendre-Polynom. Für die Auswertung des ASoW-Integrals benötigt man die Fouriertransformierte von (A.6):

$$\begin{aligned} \tilde{\sigma}_{inf}(k_x) = & \frac{k_{IDT} V \varepsilon_p^S}{K [\cos(\mu \pi/2)]} \sum_{n=1}^{\infty} P_{n-1} [\cos(\mu \pi)] i\pi * \\ & * (\delta[(2n-1) k_{IDT} + k_x] - \delta[(2n-1) k_{IDT} - k_x]) \end{aligned} \quad (A.7)$$

Aufgrund der Deltadistribution δ erhält man nur eine Anregung für den resonanten Wellenvektor k_{IDT} und seine ungeraden Vielfachen, die $k_x = \pm k_{IDT}(2n-1)$ erfüllen. Beträgt die Elektrodenbreite gerade $\lambda/4$ (also Metallisierungsverhältnis $\mu = 1/2$), so verschwinden die ungeraden Legendre-Polynome $P_{2m+1} [\cos(\pi/2)] = 0$ ($m \geq 0$) und damit die Anregungen für gerade n . Dieser Effekt von Split-1 IDTs ist auch in [Datta86] S105 beschrieben. Diese scharfen Resonanzbedingungen sind natürlich eine Folge der Annahme, dass der IDT unendlich viele Finger besitzt.

Für einen IDT mit endlicher Anzahl an Fingerpaaren N_P lässt sich die Oberflächenladungsdichte numerisch berechnen. In Abb. A.3A ist dies in COMSOL Multiphysics mit einer elektrostatischen Simulation eines IDTs mit $N_P = 10$ und $\mu = 1/2$ (Konfiguration IDT2 nach Tab. B.2) vollzogen. Die elektrostatische Approximation ist nach [Auld73A] erlaubt, weil die Schallwelle erheblich langsamer als die Lichtgeschwindigkeit propagiert. Auffallend ist die repetitive Struktur der Ladungsdichte im Innenbereich des IDT, die nur an den Enden des IDTs abweicht. Analytisch lässt sich ein Näherungsausdruck für die Ladungsverteilung eines endlichen IDTs aus Gl. (A.6) errechnen, indem man ab den Enden des IDTs die Ladungsdichte mit der Heavyside-Funktion H löscht:

$$\begin{aligned} \sigma(x) = & \frac{k_{IDT} V \varepsilon_p^S}{K [\cos(\mu \pi/2)]} \sum_{n=1}^{\infty} P_{n-1} [\cos(\mu \pi)] \sin[(2n-1) k_{IDT} x] * \\ & * \left(H \left(x + \frac{N_P \pi}{k_{IDT}} \right) - H \left(x - \frac{N_P \pi}{k_{IDT}} \right) \right) \end{aligned} \quad (A.8)$$

Berechnet man nun Gl. (A.8) (Summe beschränkt auf $n = 1400$) in Abb. A.3B, so zeigen sich quantitative Abweichungen erst auf den beiden End-Fingerpaaren. Für IDTs in

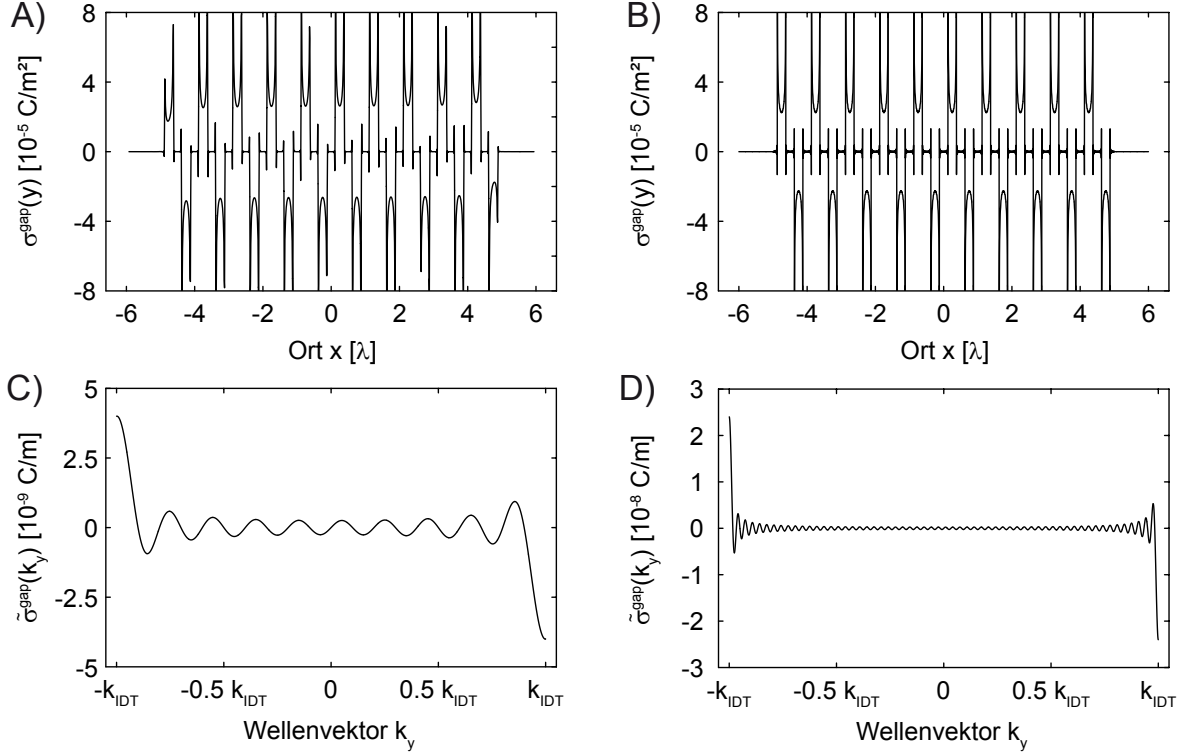


Abbildung A.3 Berechnungen zur Ladungsdichte auf LiNbO₃ Y-Cut $x = Z$, $y = X$ (vgl. Abb. 2.2C): **(A)** Die Oberflächenladungsdichte auf einem IDT mit ($N_P = 10$) (IDT2 nach Tab. B.2) ist mit COMSOL Multiphysics simuliert und in **(B)** die analytische Vergleichsrechnung mit [Engan69] gegenübergestellt. **(C)** Die analytische Fourier-Transformierte der Oberflächenladungsdichte für einen IDT mit ($N_P = 10$) zeigt dessen relative breitbandige Anregung. **(D)** Die Fourier-Transformierte eines ($N_P = 60$)-IDTs (IDT3 nach Tab. B.2) erlaubt hauptsächlich Anregung um die resonanten Wellenvektoren $\pm k_{\text{IDT}}$.

der Mikrofluidik ist meist ($N_P \geq 40$) wegen des Bedarfs an großen SAW-Amplituden, sodass diese Endeffekte vernachlässigbar sind. Die Fourier-Transformierte für den endlichen IDT lautet dann:

$$\begin{aligned} \tilde{\sigma}(k_x) = & \frac{k_{\text{IDT}} V \varepsilon_p^S}{K [\cos(\mu \pi/2)]} \sum_{n=1}^{\infty} P_{n-1} [\cos(\mu \pi)] * \\ & * \left(\sin \left[\frac{((2n-1) k_{\text{IDT}} + k_x) N_P \pi}{k_{\text{IDT}}} \right] \left(\frac{i}{(2n-1) k_{\text{IDT}} + k_x} + \pi \delta[(2n-1) k_{\text{IDT}} + k_x] \right) - \right. \\ & \left. - \sin \left[\frac{((2n-1) k_{\text{IDT}} - k_x) N_P \pi}{k_{\text{IDT}}} \right] \left(\frac{i}{(2n-1) k_{\text{IDT}} - k_x} + \pi \delta[(2n-1) k_{\text{IDT}} - k_x] \right) \right) \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Durch den Term $i / ((2n-1) k_{\text{IDT}} \pm k_x)$ führen zusätzliche Wellenvektoren ebenfalls zur Anregung. Für $n \rightarrow \infty$ werden somit alle möglichen Anregungen erfasst. Das ASoW Integral ist jedoch beschränkt auf die möglichen Wellenvektoren $-k_{\text{IDT}} \leq k_x \leq k_{\text{IDT}}$. Wird nun der IDT in der Grundfrequenz betrieben, so sind die höheren Harmonischen für $n > 1$ kaum mehr von Bedeutung, insbesondere wenn für $\mu = 1/2$ die Ordnung $n = 2$ wegen des Legendre-Polynoms verschwindet. Deshalb beschränken wir uns im

folgenden auf $n = 1$. Für $k_x \rightarrow \pm k_{IDT}$ berechnet man den Grenzwert:

$$\lim_{k_x \rightarrow \pm k_{IDT}} \tilde{\sigma}(k_x) = \mp \frac{k_{IDT} V \varepsilon_p^S}{K [\cos(\mu \pi/2)]} P_0 [\cos(\mu \pi)] * \frac{4i N_P \pi - (2i + k_{IDT} \pi) \sin(2N_P \pi)}{4k_{IDT}} \quad (A.10)$$

Da die Fingerpaarzahl N_P ein ganzzahliger Wert ist, vereinfacht sich Gl. (A.10) zu:

$$\lim_{k_x \rightarrow \pm k_{IDT}} \tilde{\sigma}(k_x) = \mp \frac{i N_P \pi V \varepsilon_p^S}{K [\cos(\mu \pi/2)]} P_0 [\cos(\mu \pi)] \quad (A.11)$$

Damit ist die Ladungsverteilung auf den Fingern analytisch für den relevanten Bereich bekannt und lässt sich mit der sinc-Funktion vereinfachen zu:

$$\tilde{\sigma}^{gap}(k_x) = \frac{i N_P \pi V \varepsilon_p^S}{K [\cos(\mu \pi/2)]} P_0 [\cos(\mu \pi)] * \left(\text{sinc} \left[\frac{(k_{IDT} + k_x) N_P \pi}{k_{IDT}} \right] - \text{sinc} \left[\frac{(k_{IDT} - k_x) N_P \pi}{k_{IDT}} \right] \right) \quad (A.12)$$

In Abb. A.3C zeigt die Fourier-Transformierte eines ($N_P = 10$)-IDTs (Konfiguration IDT2 nach Tab. B.2) nach Gl. (A.12), dass dieser IDT breitbandig anregbar ist. Sobald die Fingerzahl erhöht wird, verdeutlicht das Beispiel in Abb. A.3D für ($N_P = 60$) (Konfiguration IDT3 nach Tab. B.2), dass nur noch Anregung um k_{IDT} möglich ist, die zudem sechsmal stärker ist.

A.4 Modellierung mit Punktquellen

Die Modellierung von IDTs mit auf den Fingern verteilten Punktquellen ermöglicht die Berechnung beliebiger IDT-Strukturen, wie in [Streibl00]. Allerdings erhält man keine realen Potentialwerte und die Berechnungen sind sehr aufwändig. Die Berechnung mit dem ASoW-Formalismus benötigt zunächst das Wellenspektrum einer Punktquelle. Die 2d-Fourier-Transformierte einer Punktladung ist 1, weshalb nach [Visintini90] das Wellenspektrum gegeben ist durch:

$$\tilde{S}_{Pkt}(k_y) = i \frac{\Gamma'(k_y)}{\varepsilon_p^\infty(k_y) \gamma(k_y)} \quad (A.13)$$

Entsprechend ergibt sich das ASoW-Integral der N_L Ladungen:

$$\phi(x, y) = \frac{1}{2\pi} \int_{k_{0y}^{min}}^{k_{0y}^{max}} \tilde{S}_{Pkt}(k_{0y}) \sum_{n=1}^{N_L} \exp[-i |(x - x_n) k_{0x}(k_{0y}) + (y - y_n) k_{0y}|] dk_{0y} \quad (A.14)$$

Dies lässt sich nun als Vergleichsberechnung zur überlappungsbasierten Modellierung verwenden. In Abb. A.4 ist der Verlauf des Betragsquadrats des Potentials ϕ entlang

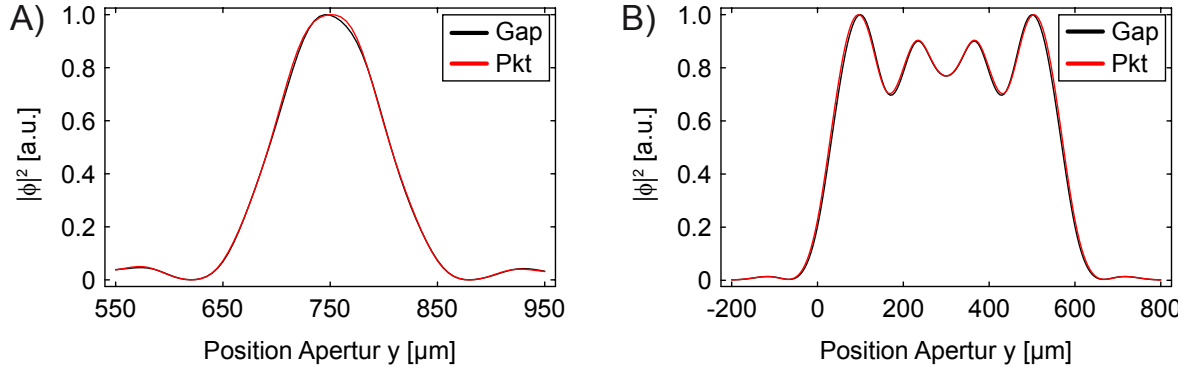


Abbildung A.4 Vergleich von überlappungsbasierter (Gap) und punktquellenbasierter (Pkt) Modellierung auf LiNbO_3 Y-Cut $x = Z$, $y = X$ (vgl. Abb. 2.2C): **(A)** Die Graphen zeigen den Verlauf des Betragsquadrats des Potentials parallel zur Apertur in einem Abstand $x = 1.6 \text{ mm}$ von der TIDT-Mitte. Für den TIDT1 aus Tab. B.2 berechnete Profile stimmen für beide Modellierungen gut überein. **(B)** Auch im Falle des normalen IDT3 aus Tab. B.2 (Abstand $x = 1.6 \text{ mm}$) ergeben sich praktisch identische Graphen.

der Apertur aufgetragen. Um die beiden Arten der Modellierung vergleichen zu können, wurden die Kurven jeweils auf ihren Maximalwert normiert, da die punktquellenbasierte Modellierung keine realen Potentialwerte liefert. Für die Graphen in Abb. A.4A wurde die Konfiguration TIDT1 aus Tab. B.2 herangezogen und es zeigt sich hervorragende Übereinstimmung der beiden Modellierungen. Im Fall eines normalen IDTs verdeutlicht Abb. A.4B am Beispiel der Konfiguration IDT3 aus Tab. B.2 die Anwendbarkeit der überlappungsorientierten Modellierung.

A.5 Akustische Reflexionen an Grenzflächen

Die Brechung und Reflexion von Schallwellen an Grenzflächen ist in dieser Arbeit ein wichtiger Punkt. In diesem Abschnitt werden die gängigen Grenzflächen unserer Mikrofluidik-Chips eingehender betrachtet.

An der Grenzfläche Wasser-Glas kann man den Einfallswinkel $\theta_{H_2O}^G$, ab welchem Totalreflexion auftritt, aus dem Snellius-Gesetz [Stöcker98] ermitteln, indem man den Brechungswinkel in Glas θ_{Glas} maximal annimmt:

$$\frac{\sin(\theta_{H_2O})}{\sin(\theta_{Glas})} = \frac{v_{H_2O}}{v_{Glas}} \quad (\text{A.15})$$

$$\theta_{Glas}^G = \pi/2 \quad (\text{A.16})$$

$$\sin(\theta_{H_2O}^G) = \frac{v_{H_2O}}{v_{Glas}} < \frac{v_{H_2O}}{v_{SAW}} = \sin(\theta_R) \quad (\text{A.17})$$

$$\theta_{H_2O}^G = 16^\circ \quad (\text{A.18})$$

Man sieht also, dass für Winkel oberhalb $\theta_{H_2O}^G$ die Schallwellen total reflektiert werden. Darüber hinaus erkennt man, dass der Rayleigh-Winkel θ_R größer als $\theta_{H_2O}^G$ ist, und damit Schallwellen immer total reflektiert werden, die ohne Ablenkung (durch

z.B. den Meniskus des Katenoids) unter dem Rayleigh-Winkel zum Glasdeckel propagieren. Nach dieser Abschätzung ist die Annahme von Totalreflexion für einen großen Winkelbereich erfüllt.

Genauere Analysen für die Grenzfläche Wasser-LiNbO₃ 128° rot Y-Cut erfordern die Anwendung der Fresnel-Gleichungen, die insbesondere im anisotropen Fall ([Auld73B] S38) eine besondere Herausforderung darstellen und den Rahmen dieser Arbeit bei weitem übersteigen. Anhand der Messungen in Abb. 4.8 lässt sich aber eine Abschätzung für die Grenzfläche Wasser-LiNbO₃ 128° rot Y-Cut anstellen. Im Reservoir der Länge $l_1 = 866 \mu\text{m}$ ist bereits der Hauptanteil der SAW Energie W_0 ins Wasser abgegeben worden:

$$W_0 - W_0 \exp\left(-\frac{l_1}{l_{\text{SAWX}}}\right) \approx 0.998 W_0 \quad (\text{A.19})$$

Der Betrag der bei (7) transmittierten Energie W_7 lässt sich durch Integration der Spitze ermitteln, die Gesamtenergie W_0 näherungsweise durch Integration des gesamten Signals ohne Wasser. Es ergibt sich ein Verhältnis $W_7/W_0 \approx 0.02$, also eine geringe Transmission der ins Wasser abgegebenen Energie zurück auf das Substrat in Form von SAWs. Die Annahme einer total reflektierenden Grenzfläche Wasser-LiNbO₃ 128° rot Y-Cut ist somit eine adäquate Näherung. Über die Transmission von Energie in generierte Volumenwellen (BAWs) z.B. für die $\perp X$ -Richtung kann so keine Aussage getroffen werden. Würde dieser Mechanismus eine dominante Rolle spielen, so würde allerdings die angenommene 1/e-Abklinglänge im Wasser nach Gl. (4.28) zu groß sein, da diese nur den viskosen Energieverlust beinhaltet. Entsprechende Auswirkungen wären in mangelnder Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment zu erkennen.

Im Fall der Grenzfläche zwischen Wasser und Luft ist die Abschätzung erheblich einfacher. Nach [Edmonds81] lässt sich der Reflexionskoeffizient R_W der Energie zwischen zwei Flüssigkeiten durch folgenden Ausdruck bestimmen:

$$R_W = \left(\frac{\cos(\theta_2)/\cos(\theta_1) - Z_2/Z_1}{\cos(\theta_2)/\cos(\theta_1) + Z_2/Z_1} \right)^2 \quad (\text{A.20})$$

Hierbei ist θ_1 der Einfallswinkel in Medium 1, θ_2 der Brechungswinkel in Medium 2 und $Z_i = \rho_i v_i$ die akustische Impedanz des jeweiligen Mediums. Wertet man dies für Wasser (Medium 1) und Luft (Medium 2) aus, so erhält man für $0 \leq \theta_1 \leq 90^\circ$ stets $R_W \geq 0.999$, sodass die Annahme der Totalreflexion angemessen ist.

A.6 Qualitätsoptimierung von Gittern

Wie bereits in Kapitel 4.4.4 erwähnt, entscheidet die Qualität des Gitters bisweilen, ob und wann der Löser konvergiert. Die optimale Qualität eines Gitters hängt von einigen Faktoren ab, die hier kurz vorgestellt werden.

Viele Elemente im FEM-Modell des Surface Evolver begrenzen i.a. schnell die erreichbare Maximalqualität des Gitters. Sie führen bei Import und Analyse in COMSOL

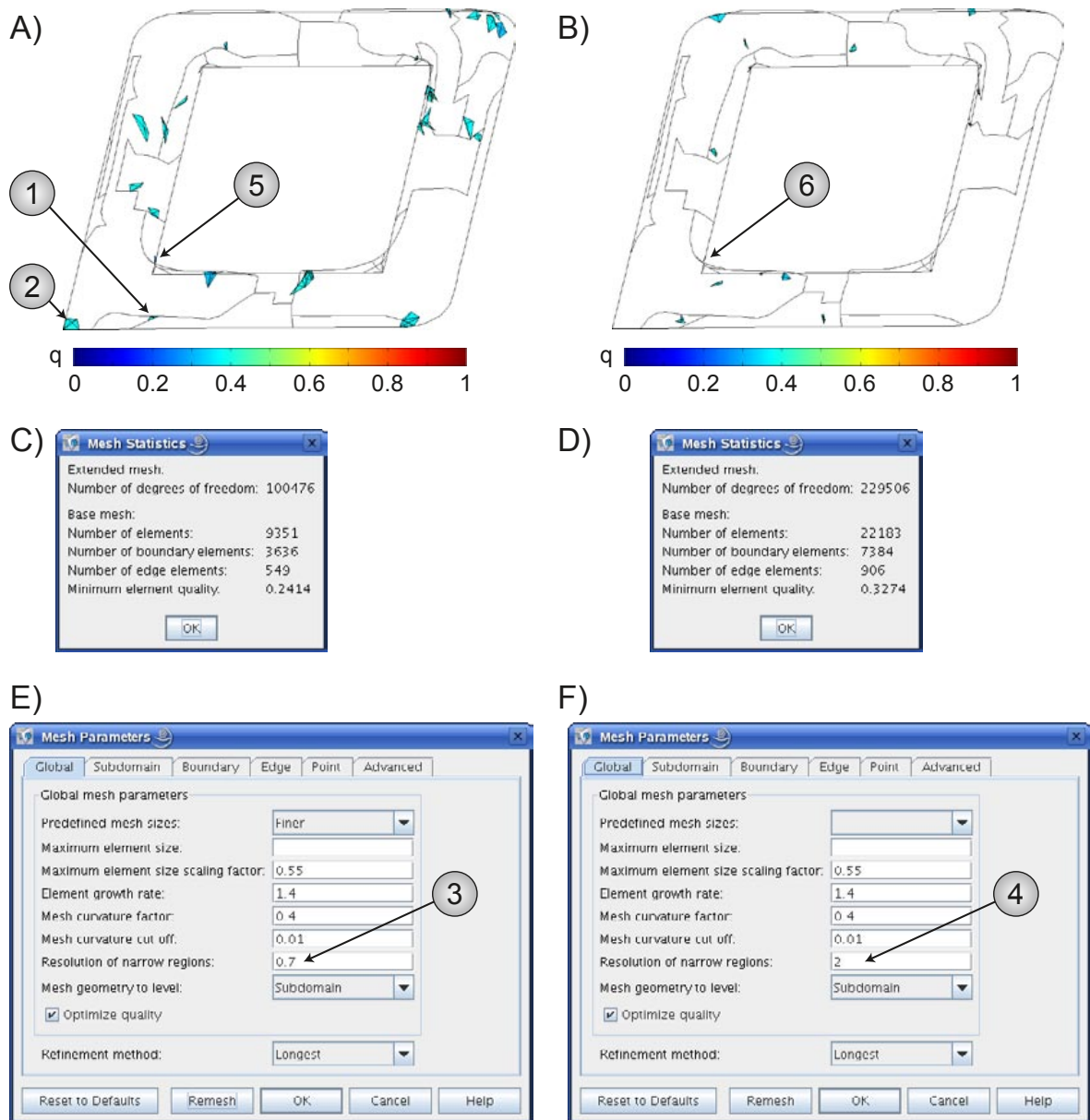


Abbildung A.5 (A) An den (auch in Abb. 4.19A) markierten Stellen (1) und (2) werden Gitterelemente mit Qualität $q \leq 0.4$ erzeugt. Die minimale Qualität des Modells wird durch das winzige und stark verzerrte Element (5) bestimmt. (B) Die Variation der Parameter des Gitter-Generators führt zu einer Reduzierung der schlechtesten Gitterelemente (6). Dadurch kann die minimale Qualität von (C) $q_{min} = 0.2414$ auf (D) $q_{min} = 0.3274$ verbessert werden. In diesem Fall muss dazu die Auflösung enger Regionen von (C) 0.7 (siehe (3)) auf (D) 2 (siehe (4)) erweitert werden.

Multiphysics meist zu sehr kleinen Grenzflächengebieten (durch Linien voneinander getrennte Gebiete auf der Grenzfläche in Abb. 4.19A), die dann bei der Gittergenerierung in COMSOL Multiphysics zu verzerrten Elementen führen. Im Beispielmmodell aus Kapitel 4.4.4 bekommt man solche Gebiete hauptsächlich an den Ecken der Bahn-Innenseite, wo die Krümmung groß ist (vgl. (3) in Abb. 4.19A).

Doch selbst für gröbere Modelle des Surface Evolver spielen bei der Analyse des FEM-Modells durch COMSOL Multiphysics die beim Import angegebenen Winkel eine Rolle. Der Maximalwinkel zwischen zwei beliebigen Grenzflächenelementen einer Fläche (*Max. angle between boundary elements*) und der Maximalwinkel, bei dem zwei benachbarte Grenzflächenelementen noch zu einer Fläche zählen (*Max. angle between neighboring boundary elements*), wirken sich auf die Gebieteinteilung (vgl. Abb. 4.19A) aus und können ebenfalls zu kleinen Grenzflächengebieten führen. Für diese beiden Winkel kann hier keine Empfehlung abgegeben werden, da sie offensichtlich von der importierten Geometrie abhängen.

Für ein importiertes Gebiet kann durch Variation der Gitterparameter die Qualität i.a. deutlich verbessert werden. Auch hier sind Empfehlungen schwierig, da bei einem Modell bisweilen der gleiche Parametersatz nicht zum gleichen Gitter führt. Die Suche nach den richtigen Parametern im *Trial and Error*-Verfahren wird allerdings erleichtert durch die Visualisierung der Gitterqualität. Im Beispiel von Abb. A.5A ist die Menge der angezeigten Elemente eingeschränkt durch die Bedingung $q \leq 0.4$ (mit q nach Gl. (4.63)), und man erkennt sofort die Problemstellen (1) und (2), die bereits in Abb. 4.19A angesprochen wurden. Die minimale Elementqualität ergibt sich nach Abb. A.5C zu $q_{min} = 0.2414$, wenn die Gittergenerierung wie in Abb. A.5E parametrisiert wird. Dieser Wert wäre für die Lösung der Differentialgleichungen als unkritisch zu erachten, es besteht allerdings durchaus Verbesserungspotential. Hier reicht es aus, die Auflösung enger Ecken von 0.7 in (3) auf 2 in (4) zu erhöhen, um eine Verbesserung des Gitters um ca. 30% auf $q_{min} = 0.3274$ zu erzielen. Das Element (5), das die Gitterqualität minimierte, verschwindet dadurch (vgl. Abb. A.5B (6)). Durch die Veränderung umfasst die Diskretisierung an den richtigen Stellen insgesamt ca. 2.5 mal mehr Elemente. Die pauschale Verfeinerung der gesamten Volumendiskretisierung erreicht oft keine Verbesserung der Gitterqualität.

Als Fazit bleibt anzumerken, dass sich die Suche nach den korrekten Gitterparametern durch die Visualisierungsoptionen einfach und nicht zu zeitraubend gestaltet. In Anbetracht der Fülle an Simulationsmöglichkeiten, die beliebige freie Oberflächen bieten, ist der Aufwand für deren korrekte Analyse und Diskretisierung in jedem Fall vertretbar.

A.7 Zusätzliche Informationen zum Surface Evolver

In Kapitel 4.4.1 wurde bereits angesprochen, dass der Surface Evolver über Befehle verfügt, die verwendet werden können, um im Endmodell gleichmäßigere Dreiecke zu erhalten. Anhand des bereits in Kapitel 4.4.1 aufgegriffen Beispiels einer Fluidikbahn

wird das Vorgehen erläutert.

Der Befehl „r“, der unspezifisch die Verfeinerung vervierfacht, führt in der Regel zu riesigen Modellen mit einer großen Zahl von verzerrten Dreiecken und unzureichender Auflösung der Regionen mit großer Krümmung. Aus diesem Grund schlägt dann auch der Import solcher Modelle in COMSOL Multiphysics fehl und es müssen unpräzisere Modelle eingesetzt werden. Deshalb findet hier der Befehl *r* nur gelegentlich Anwendung. Im wesentlichen benötigt man für kompatible, präzise Modelle eine erfolgreiche Abfolge folgender fortgeschrittener Befehle (aus Surface Evolver-Dokumentation):

- *u* (*Equiangulate*): Versuch der Winkelangleichung.
- *K %1* (*Skinny triangle long edge divide*): Teilt ein verzerrtes Dreieck mit Winkel $\leq \%1$ in der Mitte der längsten Kante in zwei Dreiecke (danach sollte immer *u* folgen).
- *V* (*Vertex averaging*): Verteilt die Knotenpunkte mit Volumenerhaltung in 1. Ordnung.
- *l %1* (*Subdivide long edges*): Teilt Kanten mit einer Länge $\geq \%1$ und erzeugt neue Dreiecke.
- *t %1* (*Remove tiny edges*): Entfernt winzige Kanten mit einer Länge $\leq \%1$ und benachbarte Flächen.
- *n %1* (*Notch ridges and valleys*): Teilt benachbarte Flächenelemente, wenn deren Normalenvektor einen Winkel $\geq \%1$ einschließt (danach sollte immer *u* folgen).

Der Befehl *V* verteilt die Dreieckspunkte und ist insbesondere wertvoll um einen sinnvollen Startpunkt für die Energieminimierung zu finden. Als Beispiel können so einfach Symmetrieprobleme wie in Abb. 4.13 (2) aufgelöst werden. Im Test ergibt sich, dass die obigen Befehle für Fluidik-Bahnen sehr gute Ergebnisse in den folgenden Kombinationen liefern:

```
/* Wiederhole Vertex Averaging anz-mal */
procedure wiederholeV( integer anz)
{
  local inx;
  for ( inx := 0 ; inx < anz ; inx += 1 )
  { V;};
}
/* Verfeinere an Orten starker Krümmung */
procedure starkekruemmung ( real grenz, real lae)
{
  n grenz;
  u;
  if (lae!=0) then l lae;
  wiederholeV(AVERITERA);
  g GRADITERA;
  t 10e-6;
  return;
}
/* Handle spitzwinklige und verzerrte Dreiecke */
```

```

procedure kleinewinkel ( real grenz, real lae)
{
  K grenz;
  u;
  if (lae!=0) then l lae;
  wiederholeV(AVERITERA);
  g GRADITERA;
  t 10e-6;
  return;
}
/* Führe die obigen Prozeduren alternierend anz-mal aus */
procedure alternierung ( real grenz1, real grenz2, real lae1, real lae2, integer anz)
{
  local inx;
  for ( inx := 0 ; inx < anz ; inx += 1 )
  {
    runner:=runner+1;
    printf "\nLoop %d\n",runner;
    starkekruemmung(grenz1,lae1);
    kleinewinkel(grenz2,lae2);
  };
}
/* anz-mal normale Verfeinerung */
procedure normal (integer anz)
{
  local inx;
  for ( inx := 0 ; inx < anz ; inx += 1 )
  {
    r;
    u;
    wiederholeV(AVERITERA);
    g GRADITERA;
  }
}

```

Die Prozedur „starkekruemmung“ verfeinert gezielt die Stellen großer Krümmung, also z.B. die Ecken an der Bahn-Innenseite (vgl. Abb. A.5 (5)). Zur Optimierung verzerrter Dreiecke hat sich die Prozedur „kleinewinkel“ bewährt. Beide Prozeduren führen zu ansprechenden Ergebnissen, wenn sie im Wechsel durch die Prozedur „alternierung“ ausgeführt werden. Alternativ kann auch eine normale Verfeinerung „normal“ auf Basis des Befehls *r* eingesetzt werden.

Die Verfeinerung „alternierung“ benötigt relativ lange, da das Modell sukzessive von den Orten größter Krümmung aus präzisiert wird. Deshalb wird diese Methode hauptsächlich eingesetzt, um das FEM-Modell zu erstellen und mit möglichst wenigen Elementen ein präzises Modell für COMSOL Multiphysics zu erhalten. Für die Generierung des Raytracing-Modells ist „alternierung“ nur begrenzt einsetzbar, da es nach zu häufigem Gebrauch beim Export für Mathematica 4.0 zum Surface Evolver-internen Fehler „ERROR 1200: facet index <n> is not valid“ kommen kann. Deshalb wird das Raytracing-Modell vorwiegend mit „normal“ verfeinert. Weder Mathematica 4.0 noch die SAW-Raytracing-Anwendung zeigen Probleme beim Import umfangreicher Raytracing-Modelle mit verzerrten Dreiecken. Diese erprobten Befehlskombinationen können über die Datei „erweiterte_funktionen.fe“ eingebunden werden.

Die Ausgaberroutine „vrml“ für das FEM-Modell im VRML-Format ist Teil des Surface Evolver-Installationsumfangs. Den Export des Raytracing-Modells im Mathemati-

ca 4.0-Format übernimmt die eigene Prozedur „mathematica“. Beide Funktionen sind in der Datei „ausgabe.fe“ zusammengefasst. Mit diesen erweiterten Funktionalitäten lassen sich Modelle wie das Beispiel aus Kapitel 4.4.1 ohne Anforderungen an das Rohmodell des Benutzers behandeln. Die folgenden Befehle erzeugen aus dem einfachen Rohmodell in Abb. A.6A ein präzises FEM-Modell für COMSOL Multiphysics mit Qualität $q_{min} = 0.3156$ des FEM-Gitters in Abb. A.6B:

```
#include "erweiterte_funktionen.fe"
#include "ausgabe.fe"
/* Initialisiert Grafikmodus */
s
R
45u
e
q
/* Behandle zunächst verzerrte Dreiecke, die vom Benutzer definiert wurden */
kleinewinkel(0.5,0)
/* Verfeinere dann einmal global und unspezifisch */
normal(1)
/* Alternierungsschritte, welche die übrig gebliebenen langen Kanten verkleinern */
alternierung(0.5,0.2,0,200e-6,2)
/* Normale Alternierungsschritte */
alternierung(0.38,0.2,0,0,50)
/* Letzte Iterationen ins Energieminimum */
hessian;hessian;hessian;hessian
vrml>>"diss_suel_eckig.wrl"
```

Bei der Verwendung elementarer Befehle wurde die maximale Verfeinerung für das Modell in Abb. A.6C erzielt. Darüber konnte das Modell nicht mehr in COMSOL Multiphysics importiert werden. Man erkennt deutlich, dass die Ecken in (1) mit erheblich höherer Genauigkeit approximiert werden können als in (2), wenn die vorgestellten spezifischen Verfeinerungen angewendet werden. Die folgende Abfolge wird zur Generierung des Raytracing-Modells in Abb. A.6D eingesetzt:

```
#include "erweiterte_funktionen.fe"
#include "ausgabe.fe"
/* Initialisiert Grafikmodus */
s
R
45u
e
q
/* Behandle zunächst verzerrte Dreiecke, die vom Benutzer definiert wurden */
kleinewinkel(0.5,0)
/* Verfeinere dann einmal global und unspezifisch */
normal(1)
/* Alternierungsschritte, welche die übrig gebliebenen langen Kanten verkleinern */
alternierung(0.5,0.2,0,200e-6,2)
/* Normale Alternierungsschritte */
alternierung(0.2,0.2,0,0,2)
/* Verfeinere dann einmal global und unspezifisch */
normal(1)
/* Letzte Iterationen ins Energieminimum */
hessian;hessian;hessian;hessian
mathematica>>"facets_diss_suel_eckig.nb"
```

Damit ist gewährleistet, dass auch stark gekrümmte Oberflächen glatt approximiert werden. Somit stehen Konzepte bereit, um sowohl für die Simulation der Fluidik als auch das Raytracing adäquate Genauigkeit zu erhalten.

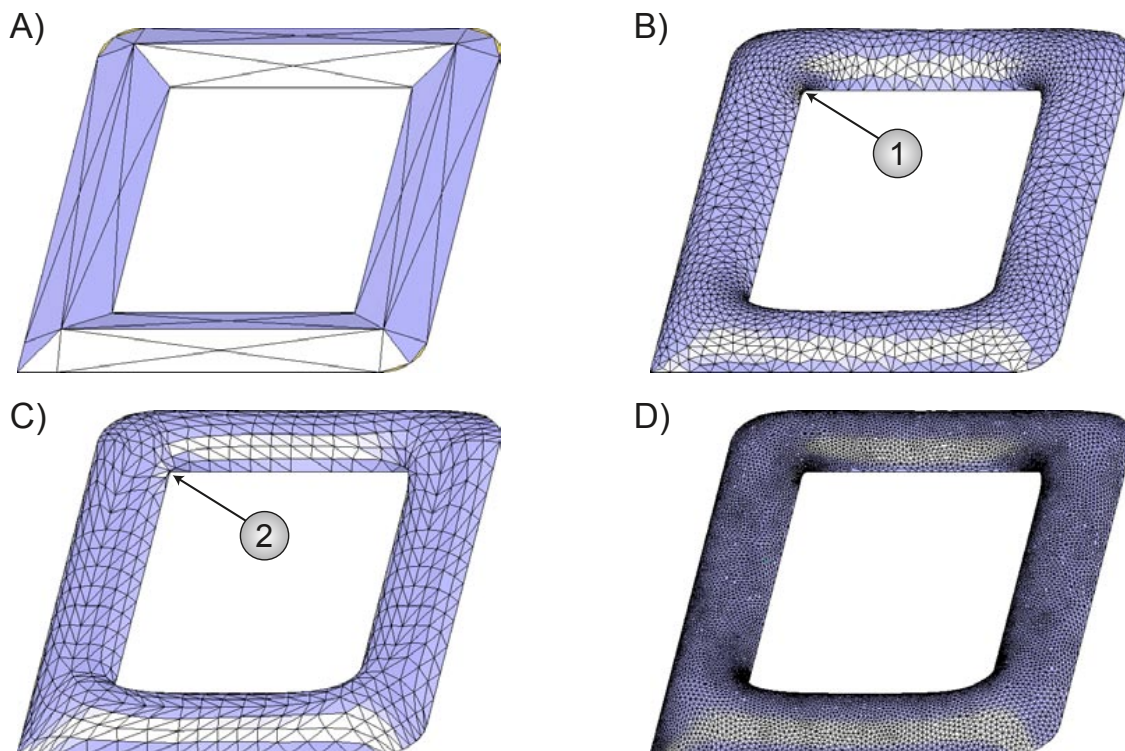


Abbildung A.6 Verschiedene Modellierungen im Surface Evolver: **(A)** Das Rohmodell für die Entwicklung mit fortgeschrittenen Befehlen bedarf keiner besonderen Anforderungen. **(B)** Das mit spezifischen Verfeinerungen entwickelte Modell verbessert vor allem an Orten hoher Krümmung die Präzision erheblich **(1)**. **(C)** Bei der Verwendung der Grundbefehle ist diese Präzision nicht erreichbar **(2)**, weil sonst der Import in COMSOL Multiphysics fehlschlägt. **(D)** Das Raytracing-Modell kann mit maximaler Verfeinerung definiert werden, da beim Import in die SAW-Raytracing-Anwendung keine Probleme auftreten.

A.8 Fluoreszenzmikroskopie

Die Fluoreszenzmikroskopie ist eine grundlegende Observationstechnik dieser Arbeit und wird hier kurz vorgestellt. Ein herkömmliches Mikroskop beleuchtet ein Objekt und erzeugt ein vergrößertes Bild desselben. Ein Fluoreszenzmikroskop verwendet erheblich höhere Beleuchtungsintensitäten, um in einem mit Farbstoff markierten Objekt Fluoreszenz anzuregen. Das vergrößerte Abbild enthält dann nur das emittierte sekundäre Licht der Fluoreszenz.

Die Prinzipskizze eines Fluoreszenzmikroskops in Abb. A.7A zeigt, dass genau wie beim normalen Mikroskop das im Lampengehäuse erzeugte Licht durch einen Kondensor tritt, hinter dem die Strahlen relativ parallel verlaufen. Anstelle eines halbdurchlässigen Spiegels besitzt das Fluoreszenzmikroskop einen Filterwürfel, dessen Funktionsweise für den FITC Farbstoff in Abb. A.7B dargestellt ist. FITC ist ein Fluoreszenzfarbstoff, der bei $\lambda = 488\text{ nm}$ angeregt wird und dann bei $\lambda = 525\text{ nm}$ emittiert. Das einstrahlende Licht tritt durch einen Anregungsfilter (meist Interferenzfilter), der nur das blaue Anregungslicht $\lambda \approx 488\text{ nm}$ in den Filterwürfel transmittieren lässt. Ein dichroischer Spiegel hat die Eigenschaft, Licht ab einer definierten Wellenlänge transmittieren zu lassen, darunter wird es reflektiert. Deshalb stellt man diese Wellenlänge zwischen der

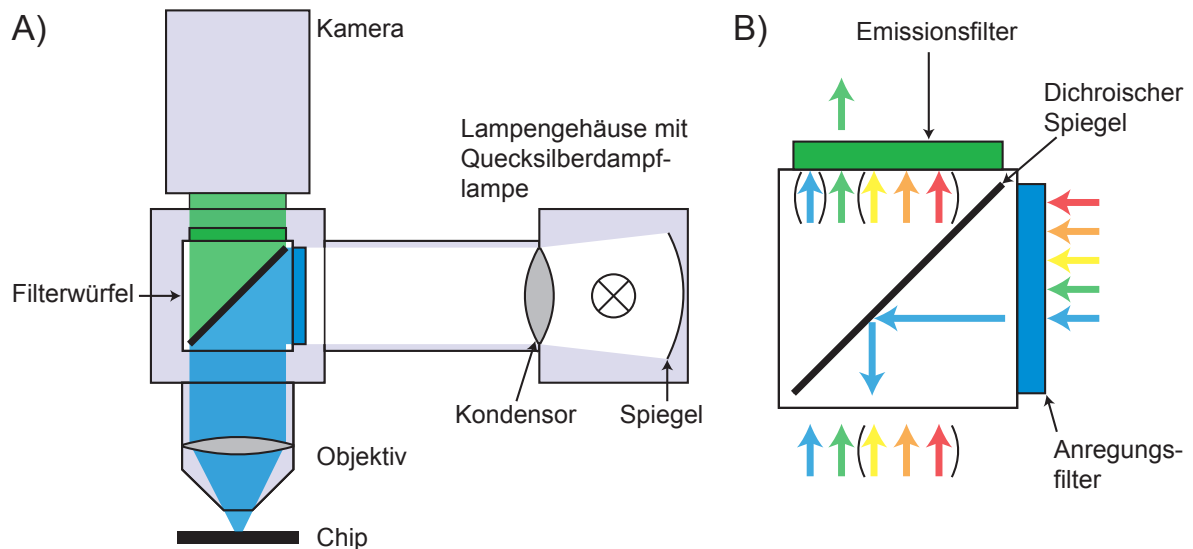


Abbildung A.7 (A) Prinzipieller Aufbau eines Fluoreszenzmikroskops. Zentrale Einheit ist der Filterwürfel, der bei herkömmlichen Mikroskopen durch einen halbdurchlässigen Spiegel ersetzt ist. **(B)** Der Filterwürfel besteht aus einem Anregungsfilter, einem Emissionsfilter und einem dichroischen Spiegel.

Anregungs- und Emissionswellenlänge des Farbstoffs ein, was hier etwa $\lambda \approx 506 \text{ nm}$ entspricht. Somit wird das blaue Licht zum Objektiv reflektiert und auf die Probe gebündelt, wo es den Fluoreszenzfarbstoff anregt. Dieser emittiert Licht bei $\lambda \approx 525 \text{ nm}$, dessen Intensität im Vergleich zum Anregungslicht verschwindend gering ist. Vom Objekt wird also höchst-intensives Anregungslicht, das Fluoreszenzlicht und evtl. breitbandiges Umgebungslicht (bei nicht ausreichender Abschattung des Labors, markiert durch Klammern und drei Farben in Abb. A.7B) abgestrahlt. Das Anregungslicht wird vom dichroischen Spiegel reflektiert, alle größeren Wellenlängen werden transmittiert. Das evtl. vorhandene Umgebungslicht wird dann am Emissionsfilter absorbiert, genauso wie z.B. gestreutes Anregungslicht im Filterblock (markiert durch Klammern und blaue Farbe in Abb. A.7B). Da demnach ausschließlich das Fluoreszenzsignal von der Kamera erfasst wird, ist die Kontrastverbesserung enorm. In unseren Wasserreservoirs wird sie darüber hinaus durch eine Goldschicht unter der SiO-Schutzschicht noch intensiviert.

Im HUND Auflichtmikroskop sind Filterwürfel für FITC- und Texas Red-Farbstoff eingebaut, sowie ein halbdurchlässiger Spiegel. So kann man mit einer normalen Halogenlampe anstelle der Quecksilberdampflampe normale Mikroskopie betreiben.

A.9 Details zur Probenherstellung

Die folgende Details beziehen sich auf die Prozessliste zur Chip-Herstellung in Kapitel 3.2.3. Als Ultraschallbad kommt stets ein Bandelin Sonorex Super10P zum Einsatz.

A.9.1 Reinigung der Substrate (1)

Die leeren Wafer wurden bei der Firma Advalytix mit einer 5-Zoll Maske belichtet, welche die einzelnen Chips mit Kontaktflächen enthält. Nach der Bedampfung und Lift-Off wurden einzelnen Chips aus dem Wafer gesägt, da LiNbO_3 aufgrund der Anisotropie nicht gebrochen werden kann. Vom Herstellungsprozess verbliebene Verunreinigungen werden in diesem Reinigungsschritt in der Reinraum-Flowbox entfernt. Die Substrate und Aceton-Selectipur werden in einen Glasbehälter „Aceton Grob“ gegeben und abgedeckt auf der Heizplatte auf ca. 80°C erhitzt. Dann wird das Gefäß im auf ca. 50°C vorgeheizten Ultraschallbad 3 min lang bei 100% Leistung platziert. Die groben Verunreinigungen sind dadurch entfernt. Danach werden die Substrate einzeln vom Gefäß „Aceton grob“ in ein neues Gefäß „Aceton fein“ transferiert und dazwischen mit einem Strahl Aceton-Selectipur gespült. Damit wird auf der Oberfläche abgelagertes Material abgespült und verhindert, dass heißes Aceton eintrocknet. Erneut wird das nun kalte Gefäß „Aceton fein“ 3 min im Ultraschallbad bei 100% Leistung aufbewahrt. Daraufhin erfolgt der Transfer der Substrate unter einem Strahl Isopropanol-Selectipur in ein „Isopropanol“-Gefäß. Isopropanol ist viskoser als Aceton und entfernt so letzte Verunreinigungen. Außerdem hinterlässt es beim Abblasen kaum Rückstände, weshalb es abschließend eingesetzt wird. Die Substrate in Isopropanol werden wieder 3 min im Ultraschallbad bei 100% Leistung gereinigt und dann einzeln entnommen, mit einem Strahl Isopropanol-Selectipur gespült und dann mit Stickstoff abgeblasen.

A.9.2 Belackung für Fotolithografie (2)

Bei der Fotolithografie wird der Positivlack Microresist Shipley 1813 homogen auf der Substratoberfläche aufgebracht. Zuvor muss er allerdings mit einem herkömmlichen Spritzenfilter (GHP Acrodisc $0.45\mu\text{m}$) gefiltert werden. Dann erfolgt das sog. *Spin coating* mit einer Süss Lackschleuder, auf der das Substrat mit einer Vakuumanasugung (Unterdruck $\approx -0.8\text{ bar}$) fixiert wird. Nach Pipettierung von etwa 10 Tropfen Lack auf die Substratoberfläche dreht die Lackschleuder das Substrat 5 s bei 800 U/min und anschließend 30 s bei 5000 U/min, wodurch eine etwa $1.3\mu\text{m}$ dicke Lackschicht auf dem Substrat entsteht. Das im Lack enthaltene Lösungsmittel wird im Ofen bei 90°C für etwa 30 min ausgeheizt.

A.9.3 Belichtung der Grundstrukturen (3)

Unter Grundstrukturen werden Elemente mit Strukturbreiten über $30\mu\text{m}$ wie die Probennummer, Zuleitungen und Positionierkreuze verstanden, die beim Design des Chip-Layouts auf der Positioniermaske Abb. 3.8E vereint werden. Die so im Vorfeld hergestellte Fotofilmmaske wird auf einen Glasobjektträger geklebt, sodass die pigmentierte Seite des Films zum Substrat zeigt. Da die Fotofilmmaske nur in einem limitierten Kreis belichtet ist (siehe A.8C), wird die Maske mit einer Abschattung für die Restbereiche (siehe Abb. 3.9C) in den Maskaligner Süss MJB3 eingebaut. Der Maskaligner betrachtet das Substrat von oben durch die Maske mittels eines integrierten Mikroskops. Das

Substrat wird vorerst bis kurz unter die Maske in den Mikroskopfokus angehoben und ist für den Benutzer nur in den transparenten Bereichen der Maske erkennbar. Mit Justierschrauben für die laterale Verschiebung und Drehung wird zunächst die Maske so am Substrat ausgerichtet, dass die später eingesetzten IDTs entlang der gewünschten Kristallachsen (reinen Moden) orientiert sind. Nach der Ausrichtung wird die Maske an die korrekte Position verfahren, wo sich die Zuleitungsenden mit den entsprechenden Kontaktflächen überlagern. Dann wird das Substrat an die Maske angepresst (*Kontaktlithografie*) und etwa 30 s mit dem Licht einer Quecksilberdampfampe belichtet, das die langen Polymerketten im Positivlack zerkleinert.

A.9.4 Entwicklung des Lacks (4)

In belichteten Zonen wird der Lack erheblich leichter löslich. Mit dem Entwickler Rohm & Haas E351 (verdünnt mit Wasser im Verhältnis 1 : 5) kann der Lack in den belichteten Zonen innerhalb von 23 s abgelöst werden. Dann wird die Probe mit Reinstwasser gespült und für etwa 10 min in den Ofen gegeben, um aufgesogenes Lösungsmittel wieder auszudampfen. Dieser Schritt ist essentiell, denn entwickelt man die im nächsten Schritt belichteten feinen Strukturen ohne vorheriges Ausdampfen des Lösungsmittels, so beginnt der Lack zu fließen. Das ist gerade bei IDT-Strukturbreiten unter $10\text{ }\mu\text{m}$ verheerend.

A.9.5 Belichtung der feinen Strukturen (5)

Wenn nun in diesem Schritt die Elemente mit Chrom-Masken belichtet werden, befinden sich also auf dem Substrat Positioniermarken, an denen die Elemente unter dem Maskaligner ausgerichtet werden können. Die Belichtungszeit reduziert sich dabei auf 19 s, da das Glas der Chrom-Masken erheblich mehr Licht transmittieren lässt als der Gigabitfilm der Fotofilmmasken. Nach der Entwicklung (23 s) und Stoppen im Reinstwasser sind alle zu metallisierenden Strukturen aus dem Lack herausgelöst.

A.9.6 Metallisierung (6)

Bevor das Metall aufgebracht werden kann, müssen in den belichteten Bereichen verbliebene Lackreste (meist nur wenige Monolagen) entfernt werden. Dies geschieht durch die Verbrennung im Sauerstoffplasma eines TePla 100-E Plasma Systems bei 400 W und einer Dauer von etwa 40 s. Der homogene Abtrag der obersten Lackschicht bringt in den belichteten Bereichen die Substratoberfläche hervor und garantiert die Haftung des Metalls beim späteren Lift-Off (folgender Abschnitt). Auf das Substrat wird mit Elektronenstrahlverdampfung bei einem Startdruck von $6 \cdot 10^{-6}$ mbar ein Schichtsystem Titan-Gold-Titan aufgebracht. Titan vermittelt dabei die optimale Haftung zwischen der Goldschicht und dem Substrat bzw. der darauf später abgeschiedenen SiO-Schicht (Abschnitt A.9.9). Dabei wird Titan jeweils in einer Dicke von 6 nm bei einer Rate von 0.1 nm/s und Gold in einer Dicke von 90 nm bei einer Rate von 0.2 nm/s aufgebracht.

A.9.7 Lift-Off des Metalls (7)

Die auf dem Lack deponierte Metallschicht lässt sich dann entfernen, indem die Substrate in Aceton-Selectipur gegeben und im Ultraschallbad bei 10–30% Leistung behandelt werden. Dadurch löst sich innerhalb von 1 min der Großteil des Lacks samt Metall ab. Nach dem Transfer (unter einem Aceton-Strahl) in ein neues Aceton-Selectipur-Gefäß können die Reste z.B. zwischen den Fingern der IDTs innerhalb von 3 min mit Ultraschall entfernt werden. Abschließend werden die Substrate wie im letzten Schritt von Abschnitt A.9.1 erläutert in Isopropanol-Selectipur gereinigt und abgeblasen.

A.9.8 Belichtung der Schutzschicht (8)

Für die lithografische Definition der Schutzschicht wird wie in Abschnitt A.9.2 erklärt eine Lackschicht aufgeschleudert. Da die Kreisfläche mit 9 mm Durchmesser eine sehr grobe Struktur darstellt, kann der Lack alternativ für 2 min bei 160° C ausgeheizt werden. Der Lack wird dadurch etwas spröde, weshalb dies für feine Strukturen ungeeignet ist. Die Belichtung der Kreisfläche wird mit der Abschattung und einem Glasobjektträger ohne zusätzliche Fotofilmmasken vorgenommen. Die Belichtungszeit liegt deshalb bei 19 s, die Entwicklung erfolgt erneut wie in Abschnitt A.9.4 beschrieben.

A.9.9 Aufdampfen der SiO-Schutzschicht (9)

Vor dem Aufbringen der Schutzschicht wird das Substrat im Sauerstoffplasma des TePla 100-E Plasma Systems 120 s lang bei 400 W gereinigt. In der Aufdampfanlage wird dann bei einem Startdruck von $1 \cdot 10^{-5}$ mbar thermisch SiO verdampft, das mit einer Rate unter 0.1 nm/s bis zu einer Dicke von 160 nm auf dem Substrat abgeschieden wird.

A.9.10 Lift-Off der SiO-Schutzschicht (10)

Wie in Abschnitt A.9.7 wird der Lift-Off für die SiO-Schutzschicht vollzogen. Dadurch werden die Kontaktflächen wieder von der isolierenden Schutzschicht befreit. Vor der Silanisierung im nächsten Abschnitt wird die SiO-Schutzschicht durch Behandlung mit dem TePla 100-E Plasma System (120 s bei 400 W) aktiviert.

A.9.11 Hydrophobe Silanisierung (11)

Die Substratoberfläche wird in diesem Schritt hydrophob gestaltet, indem sie mit einer Monolage Oktadekyltrichlorsilan (OTS) beschichtet wird. Dazu werden 100 μ l OTS in 30 ml Hexan gelöst und diese Lösung mit einem Spritzenfilter (GHP Acrodisc 0.45 μ m) filtriert. Die Chips werden auf dafür gefrästen Haltern kopfüber für 40 min im Kühlschrank bei 4° C in der Lösung gelagert. Die Chlor-Gruppen des OTS werden abgespalten und führen zur Bildung von kovalenten Si – O – Si Bindungen mit der SiO-Schutzschicht unter Erzeugung von HCl. OTS kann aber auch untereinander reagieren, wobei kleine Partikel entstehen. Damit diese sich nicht auf der Chipoberfläche absetzen

können, werden die Substrate kopfüber in die Lösung gegeben. Nach Beendigung der Reaktion werden die Substrate mit Hexan gespült, und im Abzug in ein Teflongefäß mit Chloroform transferiert. In diesem Gefäß werden die Substrate abgedeckt und auf 50° C vorgeheizten Ultraschallbad 5 min bei 100% Leistung gereinigt. Nach dem Spülen der Substrate im Abzug mit Isopropanol können die Substrate abgeblasen werden.

A.9.12 Lithografische Definition der Fluidik-Bahn (12)

Auf die hydrophobe Oberfläche wird erneut Lack aufgeschleudert. Die Parameter müssen aufgrund der hydrophoben Eigenschaften verändert werden. Nach der Pipettierung des Lacks muss eine Zeitspanne von mindestens 2 min je nach Güte der Silanisierung abgewartet werden. Derweil dampft Lösungsmittel des Lacks ab und er haftet auf der hydrophoben Oberfläche des Substrats an. Beim anschließenden Schleudern des Lacks bildet dieser dann eine geschlossene Schicht. Je besser die Silanisierung, desto eher fließt der Lack beim Schleudern von der Probe herunter und erfordert so längere Zeitspannen zum Anhaften. Trotz derselben Schleuderparameter ist die Lackdicke wegen der veränderten Flusseigenschaften des Lacks nicht immer gleich. Nach der Trocknung im Ofen (30 min bei 90° C) wird demnach die Belichtungszeit maximiert und zweimal etwa 20s belichtet. Dazwischen wird kurz gewartet, um den Lack nicht zu stark zu erhitzen. Diese Zeiten sind ausreichend um auch dicke Lackschichten mit der Fluidik-Maske auf Fotofilm im Maskaligner bis zur Substratoberfläche ausreichend zu belichten. Bei der Entwicklung nach Abschnitt A.9.4 ist dann in den belichteten Bereichen der Lack komplett entfernt.

A.9.13 Hydrophile Benetzungsmodulation (13)

Die Modulation der Benetzungseigenschaften in den belichteten Bereichen geschieht mit dem TePla 100-E Plasma System. Das Sauerstoffplasma entfernt nicht nur die letzten Lackreste, sondern verbrennt auch die Silan-Monolage, wodurch das hydrophile SiO zum Vorschein kommt. Typischerweise können mit einer Behandlung über 120s bei 400 W sehr hydrophile Fluidik-Bahnen erzeugt werden. Dieser Effekt degradiert, wenn die Chips bis zum Einsatz lange gelagert werden. Deshalb sollte dieser Schritt am besten kurz vor dem Einsatz stattfinden. Die Lagerung mit dem aufgetragenen Lack ist problemlos.

A.9.14 Einsatz der Chips (14)

Vor dem Einsatz wird selbstverständlich die Lackschicht mit Aceton entfernt. Die Chips sind so durchaus mehrmals verwendbar und können dazwischen im Ultraschallbad gereinigt werden. Nach etwa drei Anwendungen treten bei extremen Strukturen wie rechtwinkligen Ecken (Abb. 4.4.1A (1)) Abweichungen der gewünschten Benetzung auf, weil die Fluidik-Bahn nicht mehr hydrophil genug ist. Natürliche Benetzungsgebiete wie Kreise sind durchaus mehr als zwanzig mal einsetzbar. Danach muss Abschnitt

A.9.11, A.9.12 und A.9.13 wiederholt werden, um den optimalen Benetzungskontrast wieder herzustellen. In der industriellen Herstellung bei Advalytix werden solche Probleme durch optimierte Methoden der Benetzungsmodulation verringert. Die Abschnitte A.9.11, A.9.12 und A.9.13 sind nur nötig für Experimente mit freien Oberflächen dieser Arbeit, bei denen die Fluidik-Bahnen mit Benetzungsmodulation anstelle fester Wände vorgegeben werden.

A.10 Herstellung von Fotofilmmasken

In diesem Abschnitt werden Einstellungsdetails der Belichtungsanlage und Parameter zur Filmentwicklung behandelt. Größen wie der Verkleinerungsfaktor, die kleinsten auflösbaren Strukturen oder der Durchmesser der belichtbaren Fläche variieren mit dem Abstand Δh zwischen der Filtereinheit der Kamera ((9) in Abb. 3.7) und dem Projektor. Die Abhängigkeiten sind in den realisierbaren Bereichen in Abb. A.8A-C wiedergegeben. Die Graphen sind als Näherung zu verstehen, die an einigen Stellen verifiziert wurde.

Bei der Einstellung eines Verkleinerungsfaktors wird zunächst der Verschluss der Kamera dauerhaft geöffnet und die Blende auf 3.5 eingestellt. Statt des Films wird ein mit Silberstreifen beschichtetes Glas eingelegt. Dann wird ein Mikroskop an der Kamerahalterung ((8) in Abb. 3.7) montiert und darin die Ebene der Silberschicht und damit die Filmebene scharf gestellt. Nach der Entfernung des versilberten Glases kann mit dem Mikroskop das Abbild einer Vorlage in der Filmebene betrachtet werden. Dieses wird über die Schnecke der Kamera scharf gestellt. So erreicht man die maximale Schärfe der späteren Masken. Danach werden Verschluss und Blende wieder auf die zur Belichtung notwendigen Parameter umgestellt.

Die Kameraeinstellungen für zwei gängige Verkleinerungsfaktoren sind in Abb. A.8D aufgelistet. Im Prinzip führt eine Erhöhung der Blendenzahl zu mehr Schärfe, aber geringerem Lichteinfall auf den Film und somit längeren Belichtungszeiten, wodurch effektiv oft ein Schärfegewinn ausbleibt. So konnte ab Blende 8 eine deutliche Verschlechterung festgestellt werden, optimal erscheint eine Einstellung auf Blende 5.6. Die Entwicklung des Films erfolgt immer bei absoluter Dunkelheit über 6 – 7 min in AGFA Neutol Schwarz-Weiß Papierentwickler in einem Verhältnis von 15 : 1 mit Wasser verdünnt. Damit verliert der Film jegliche Grauabstufung und ist schwarz/transparent. Daraufhin wird der Film in TETENAL Superfix (5 : 1 mit Wasser verdünnt) 30 s lang fixiert. Während Fixierung und Entwicklung sollte durch Schwenken der Schalen stetig neue Lösung an den Filmabschnitt herangeführt werden. Die Filme erhalten durch die Prozedur eine leicht violette Färbung, die sich beim Waschen in Wasser (mit Benetzungsmittel AGEPON) verliert. Nach dem Trocknen kann der Filmabschnitt mit Klebestreifen auf Glasobjektträger geklebt und im Maskaligner verwendet werden.

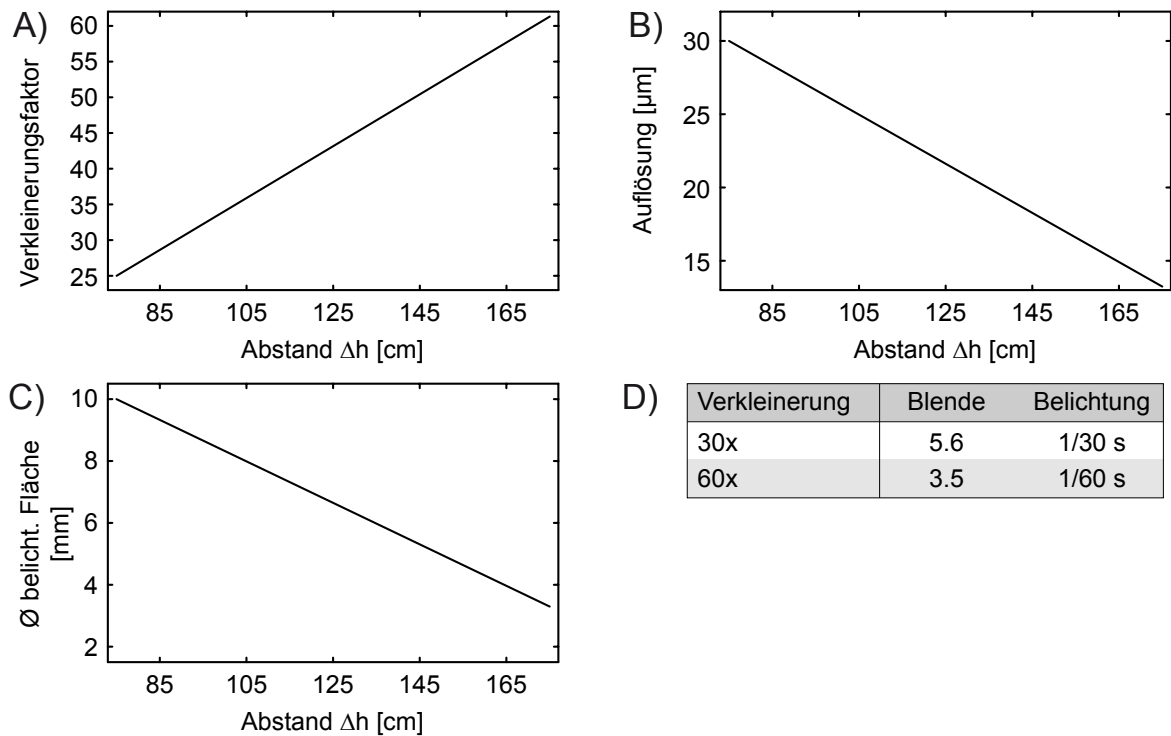


Abbildung A.8 Funktionale Zusammenhänge an der Belichtungsanlage in Abhängigkeit vom Abstand Kamerafilter-Projektor Δh : (A) Verkleinerungsfaktor, (B) kleinste auflösbare Struktur, (C) Durchmesser der belichtbaren Fläche. (D) Optimale Kameraeinstellungen für zwei gängige Verkleinerungsfaktoren.

A.11 Vergleich approximierter Schallpfad-Profile

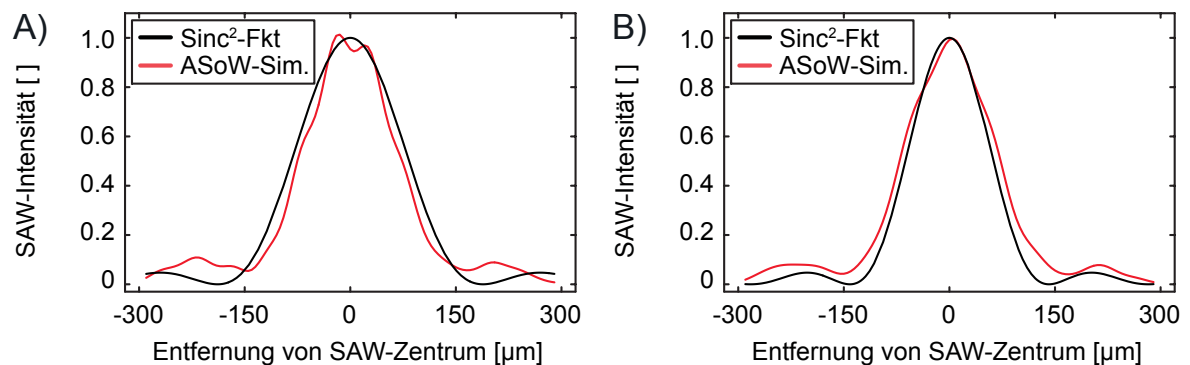


Abbildung A.9 Vergleich von Schallpfad-Profilen, die in Kapitel 5.2.3 durch eine sinc^2 -Funktion approximiert wurden, mit SAW-Intensitäts-Berechnungen nach der ASoW-Methode aus Kapitel 4.4.2: (A) TIDT I. (B) TIDT II.

A.12 Fits der Histogramm-Peaks

Die Abb. A.10 zeigt die Gauß-Fits in der Histogrammverteilung der Geschwindigkeitsquotienten q_u nach Kapitel 4.2.2.

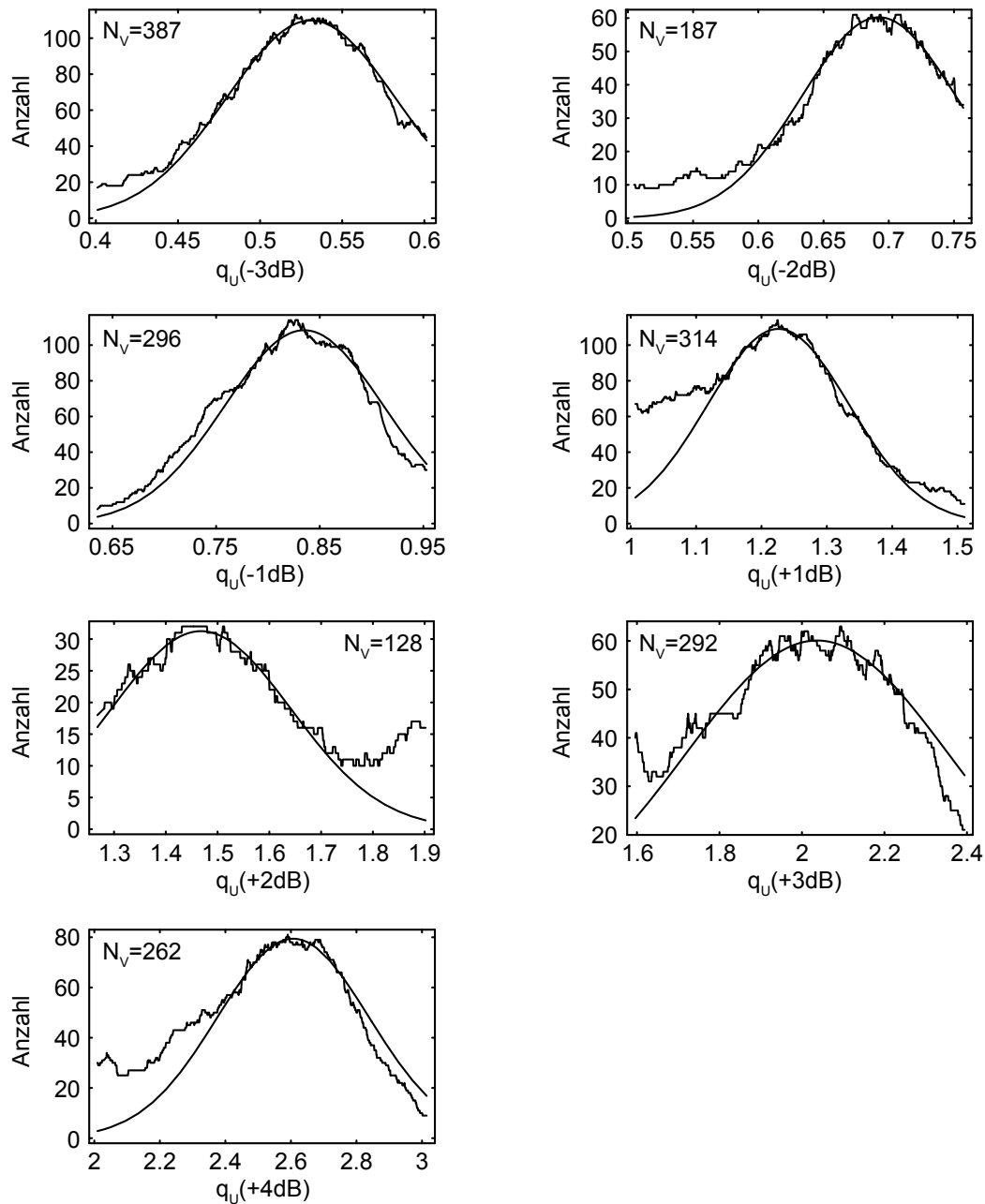


Abbildung A.10 Gauß-Fits der Histogrammverteilung der Geschwindigkeitsquotienten q_u nach Kapitel 4.2.2.

Anhang B

Verwendete Größen und Funktionen

B.1 Verwendete Zahlenwerte und Konfigurationen

phys. Größe	Wert
Dichte Wasser bei RT ρ_{H_2O} [kg/m ³]	10^3
Schallgeschwindigkeit Luft v_{Luft} [m/s]	$3.44 \cdot 10^2$
Dichte Luft bei RT ρ_{Luft} [kg/m ³]	1.29
Schallgeschwindigkeit Glas v_{Glas} [m/s]	$5.3 \cdot 10^3$
Dichte Glas ρ_{Glas} [kg/m ³]	$2.2 \cdot 10^3$
Elektr. Feldkonstante ε_0 [C/Vm]	$8.85 \cdot 10^{-12}$
Boltzmann Konstante k [J/K]	$1.38 \cdot 10^{-23}$

Tabelle B.1 Übersicht verwendeter Größen.

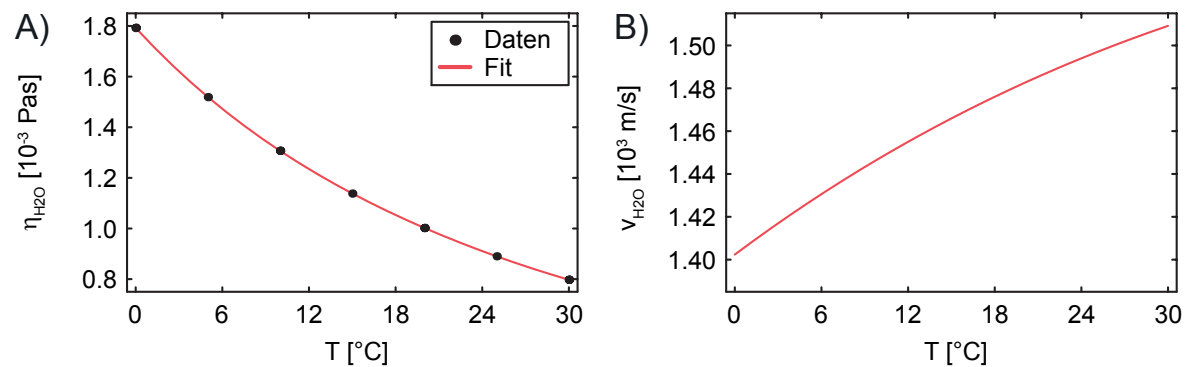


Abbildung B.1 (A) Viskosität von Wasser η_{H_2O} in Abhängigkeit von der Temperatur T nach Daten von [Kaye95, Lide95]. (B) Schallgeschwindigkeit von Wasser v_{H_2O} in Abhängigkeit von der Temperatur T nach Gl. (4.60) [Bilaniuk93, Bilaniuk96].

IDT	Apertur [μm]	Wellenlänge [μm]	Fingerpaare	y_M (vgl. Abb. 4.15, A.4) [μm]
IDT1	600	23.5	42	—
IDT2	600	25	10	—
IDT3	600	25	60	300
TIDT1	1500	23 – 28	60	0
TIDT2	1000	23.2 – 26.7	45	0

Tabelle B.2 Konfigurationen verwendeter IDTs.

B.2 Materialabhängige Tensorgrößen

Für die Berechnungen in Kapitel A.1 und Abb. B.2C sind in Tab. B.3 alle Materialtensoren in der Voigt-Notation nach [Lim03] aufgeführt.

$$\begin{aligned}
 c_{ij} &= \begin{pmatrix} 19.74 & 5.34 & 6.77 & 0.75 & 0 & 0 \\ \pm 0.14 & \pm 0.04 & \pm 0.34 & \pm 0.03 & 0 & 0 \\ 5.34 & 19.74 & 6.77 & -0.75 & 0 & 0 \\ \pm 0.04 & \pm 0.14 & \pm 0.34 & \pm 0.03 & 0 & 0 \\ 6.77 & 6.77 & 23.18 & 0 & 0 & 0 \\ \pm 0.34 & \pm 0.34 & \pm 0.68 & 0 & 0 & 0 \\ 0.75 & -0.75 & 0 & 5.92 & 0 & 0 \\ \pm 0.03 & \pm 0.03 & 0 & \pm 0.03 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 5.92 & 0.75 \\ & & & & \pm 0.03 & \pm 0.03 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0.75 & 6.77 \\ & & & & \pm 0.03 & \pm 0.34 \end{pmatrix} 10^{10} \text{ Nm}^{-2} \\
 p_{ij} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 3.62 & -2.41 \\ & & & & \pm 0.05 & \pm 0.08 \\ -2.41 & 2.41 & 0 & 3.62 & 0 & 0 \\ \pm 0.08 & \pm 0.08 & 0 & \pm 0.05 & 0 & 0 \\ 0.16 & 0.16 & 2.03 & 0 & 0 & 0 \\ \pm 0.27 & \pm 0.27 & \pm 0.35 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \text{ Cm}^{-2} \\
 \epsilon_{ij} &= \begin{pmatrix} 44.5 & 0 & 0 \\ \pm 0.5 & & \\ 0 & 44.5 & 0 \\ & \pm 0.5 & \\ 0 & 0 & 27.5 \\ & & \pm 0.5 \end{pmatrix} \epsilon_0
 \end{aligned}$$

Tabelle B.3 Übersicht von ϵ_{ij} , p_{ij} und c_{ij} nach [Lim03].

B.3 Richtungsabhängige Größen auf LiNbO_3

In Abb. B.2 sind einige richtungsabhängige Größen auf LiNbO_3 dargestellt, die z.B. für die Berechnung des ASoW-Integrals notwendig sind. Abb. B.2A zeigt den Kopplungsfaktor Γ' und Abb. B.2B die Schallgeschwindigkeit der SAW für beide Schnitte. Hierbei ist im Fall von LiNbO_3 128° rot Y-Cut ($\theta = 0^\circ$) = $\perp X$ und ($\theta = \pm 90^\circ$) = $\pm X$, bzw. für LiNbO_3 Y-Cut ($\theta = 0^\circ$) = Z und ($\theta = \pm 90^\circ$) = $\pm X$. Mit den Tensordaten aus Anhang B.2 und den Erläuterungen von Anhang A.1 kann die dielektrische Oberflächenkonstante für beide Schnitte in Abb. B.2C und D ermittelt werden.

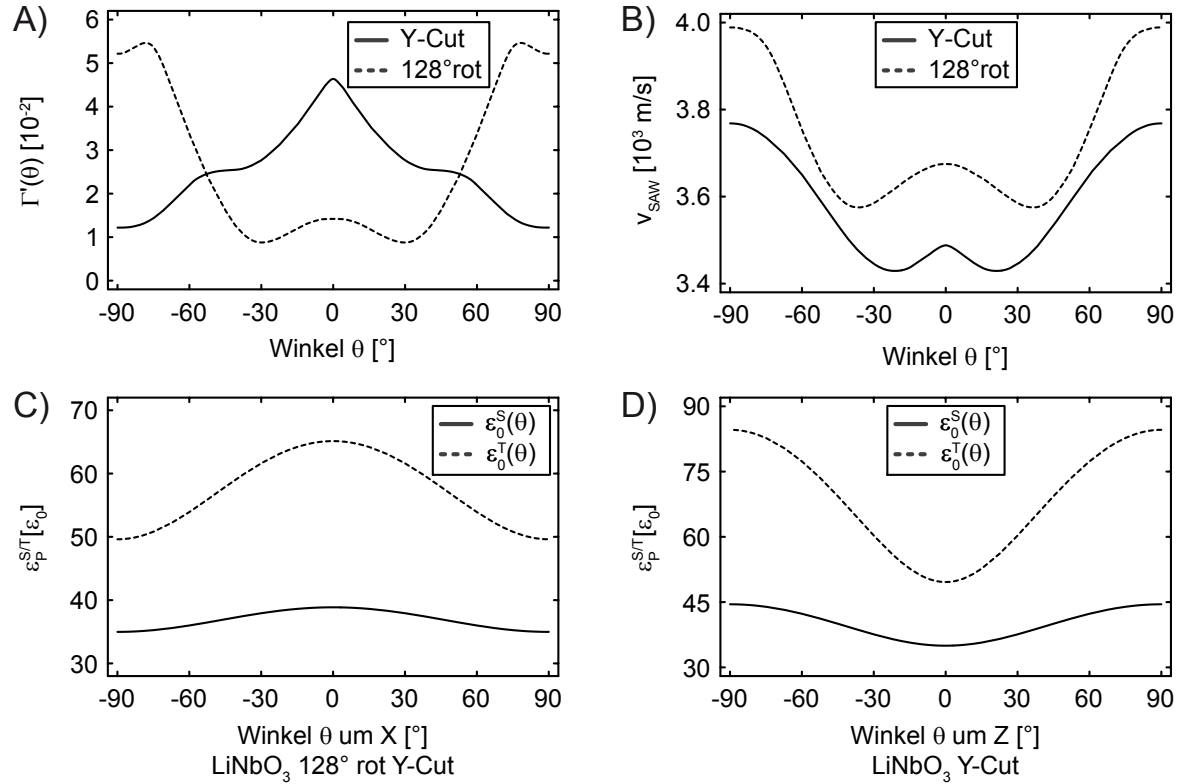


Abbildung B.2 Richtungsabhängige Größen von LiNbO_3 : **(A)** Kopplungsfaktor $\Gamma'(\theta)$ [Slobodnik73]. **(B)** Schallgeschwindigkeit der SAW [Slobodnik73]. **(C)** Dielektrische Oberflächenkonstante $\varepsilon_p^{T/S}$ nach Anhang A.1 für LiNbO_3 128° rot Y-Cut (Winkel ($\theta = 0^\circ$) = X-Richtung). **(D)** Dielektrische Oberflächenkonstante $\varepsilon_p^{T/S}$ nach Anhang A.1 für LiNbO_3 Y-Cut (Winkel ($\theta = 0^\circ$) = Z-Richtung).

B.4 Literatur: Dämpfung von Schallwellen in Wasser

Temperatur [° C]	$l_{H_2O} f^2$ [Coates89] [10^{13} m/s^2]	$l_{H_2O} f^2$ [Hagen04] [10^{13} m/s^2]	Differenz [%]
10	1.42	1.47	3.96
15	1.70	1.80	5.78
25	2.35	2.62	10.5
35	3.07	3.29	6.84

Tabelle B.4 Vergleich von Literaturquellen für die 1/e-Abklinglänge der Schallintensität in Wasser. Die Differenz beträgt durchschnittlich 7%.

B.5 Probenfoto: gebondeter Chip

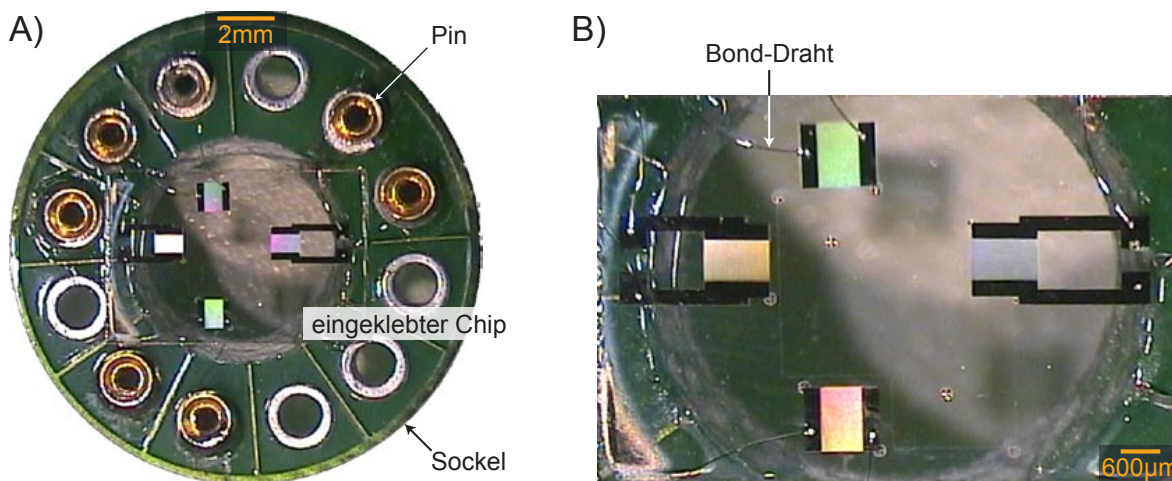


Abbildung B.3 (A) Ein Chip ist auf einen Probensockel geklebt, in den mehrere Kontaktpins eingelötet sind. Diese werden über den Probenhalter mit den Zuleitungen verbunden. (B) Dünne Bonddrähte stellen den elektrischen Kontakt zwischen Pins und den Strukturen auf dem Chip her. Dazu werden sie an beiden Stellen mit Ultraschall kaltverschweißt.

B.6 Modellerte Geschwindigkeitsfelder

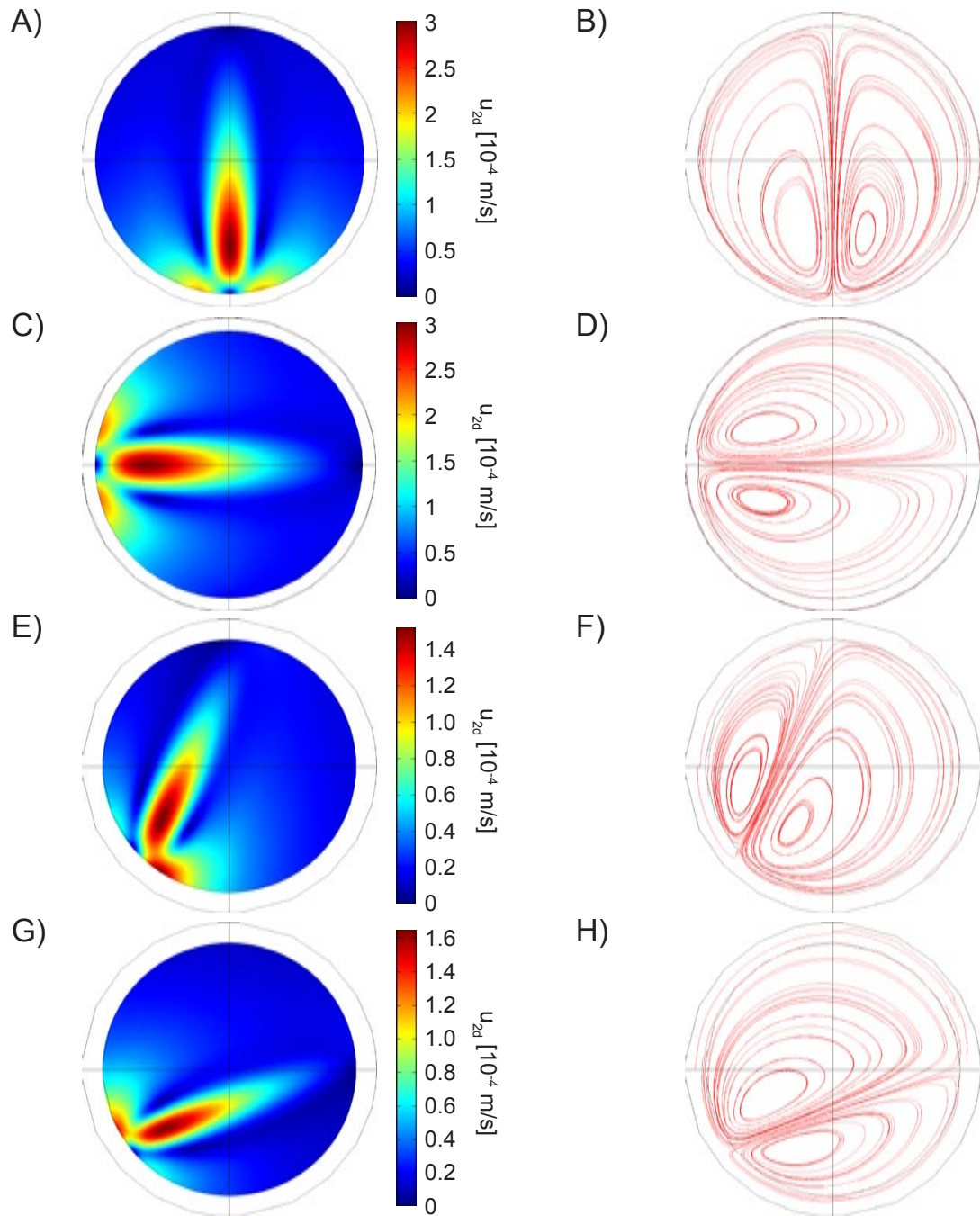


Abbildung B.4 Geschwindigkeitsfelder u_{2d} (links) und Strömungsprofile (rechts) im Dual-Modus: (A) und (B) TIDT I, (C) und (D) TIDT II. Das Geschwindigkeitsfeld im Mono-Modus kann durch Skalierung des Geschwindigkeitsfelds (C) von TIDT II gewonnen werden. Geschwindigkeitsfelder u_{2d} (links) und Strömungsprofile (rechts) im Schwenk-Modus: (E) und (F) TIDT I, (G) und (H) TIDT II.

B.7 Probenfotos

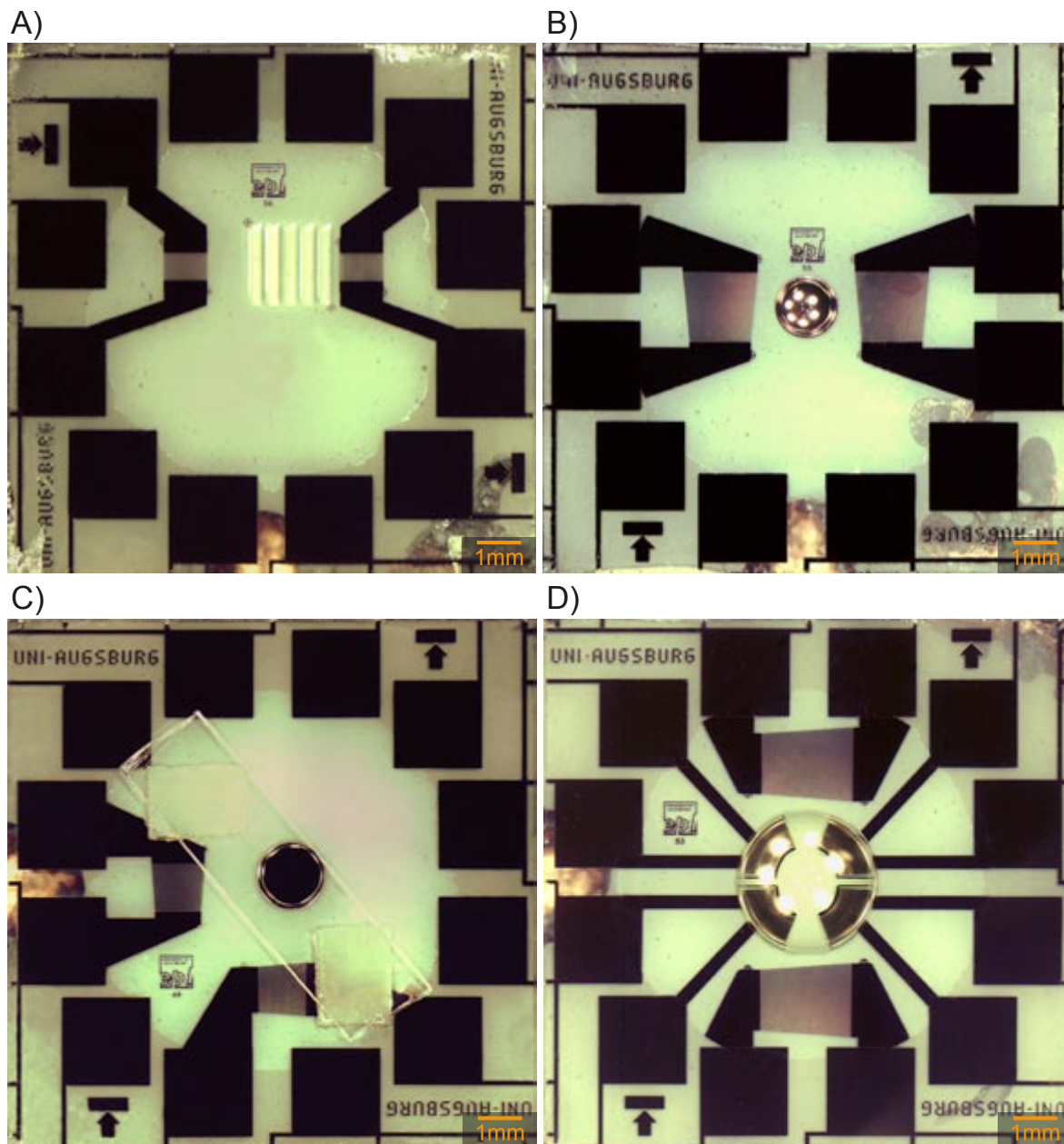


Abbildung B.5 (A) Chip zur Messung der $1/e$ -Abklinglänge der SAW-Intensität nach Abb. 4.7C. Zur Veranschaulichung der einzelnen hydrophilen Streifen wurde der Deckel entfernt. (B) Dieser Chip nach [Gogel06] wird für die Experimente in Kapitel 4.5.1 mit einem Deckel versehen (siehe Abb. 4.21A). Der hier pipettierte freie Tropfen (siehe Abb. 4.24D) wurde in Kapitel 4.5.2 untersucht. (C) Chip zum Mischen mit chaotischer Advektion im Katenoid-förmigen Fluid-Reservoir (vgl. 5.3A). (D) Chip zur SWNT-Anlagerung nach [Frommelt06] mit vier Elektrodenstrukturen (siehe Abb. 6.3A).

Literaturverzeichnis

- [Aref00] H. Aref, T.A. Dunaeva, V.V. Meleshko: „Chaotic advection by a blinking rotlet in a circle“, *Appl. Hydromechanics*, **2:1**, 3 (2000)
- [Aref84] H. Aref: „Stirring by chaotic advection“, *Journal of Fluid Mechanics*, **86**, 1 (1984)
- [Ash85] E. A. Ash, E. G. S. Paige (editors): „Rayleigh-Wave Theory and Application“, *Springer* (1985)
- [Auld73A] B. A. Auld: „Acoustic fields and waves in solids, Volume I“, *Wiley* (1973)
- [Auld73B] B. A. Auld: „Acoustic fields and waves in solids, Volume II“, *Wiley* (1973)
- [Baghai87] A. R. Baghai-Wadji: „Berechnung der Quellenverteilung zur Anregung von akustischen Wellen in Oberflächenwellenfiltern“, *Dissertation, Wien* (1987)
- [Bilaniuk93] N. Bilaniuk, G. S. K. Wong: „Speed of sound in pure water as a function of temperature“, *J. Acoust. Soc. Am.*, **93**, 3 (1993)
- [Bilaniuk96] N. Bilaniuk, G. S. K. Wong: „Erratum: Speed of sound in pure water as a function of temperature“, *J. Acoust. Soc. Am.*, **99**, 5 (1996)
- [Blistanov83] A.V. Blistanov: *Sov. Phys.-Cryst.*, **6**, 688 (1983)
- [Bottausci04] F. Bottausci, I. Mezić, C. D. Meinhardt, C. Cardonne: „Mixing in the shear superposition micromixer: three-dimensional analysis“, *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A*, **362**, 1001 (2004)
- [Brakke92] K. Brakke: „The surface evolver“, *Experimental Mathematics*, **1**, 2 (1992)
- [Bronstein99] I. N. Bronstein, K. A. Semendjajew, G. Musiol, H. Mühlig: „Taschenbuch der Mathematik, 4. Auflage“, *Harri Deutsch* (1999)

- [Cheeke81] J. D. N. Cheeke, P. Morisseau: „Attenuation of Rayleigh Waves on a LiNbO₃ Crystal in Contact with a Liquid 4He Bath“, *Journal of Low Temperature Physics*, **46**, 3/4 (1982)
- [Coates89] R. F. W. Coates: „Underwater Acoustic Systems“, *Halsted Press* (1989)
- [Comsol05A] COMSOL: „COMSOL Multiphysics Modeling Guide, Version 3.2“ (2005)
- [Comsol05B] COMSOL: „COMSOL Multiphysics User’s Guide, Version 3.2“ (2005)
- [Darrigol05] O. Darrigol: „Worlds of Flow“, *Oxford University Press* (2005)
- [Datta86] S. Datta: „Surface acoustic wave devices“, *Prentice Hall* (1986)
- [Dhont96] J. K. G. Dhont: „An Introduction to Dynamics of Colloids“, *Elsevier* (1996)
- [Dransfeld70] K. Dransfeld, E. Salzman edited by W. P. Mason, R. N. Thurston: „Excitation, detection, and attenuation of high-frequency elastic surface waves“, in: *Physical Acoustics, Principles and Methods, Vol. VII*, *Academic Press* (1970)
- [Ducrée04] J. Ducrée, R. Zengerle, J. Newman: „FlowMap“, *Books on Demand* (2004)
- [Duong06] T. T. Duong: „Neue Migrations- und Separationsmechanismen in strukturierten Mikrofluidik-Systemen“, *Dissertation, Fakultät für Physik der Universität Bielefeld* (2006)
- [Eckart48] C. Eckart: „Vortices and streams caused by sound waves“, *Physical Review Letters*, **73**, 68 (1948)
- [Edmonds81] P. D. Edmonds, F. Dunn edited by P. D. Edmonds: „Physical Description of Ultrasonic Fields“, *Academic Press* (1981)
- [Engan69] H. Engan: „Excitation of elastic surface waves by spatial harmonics of interdigital transducer“, *IEEE Transactions on Electron Devices*, **ED-16**, 1014 (1969)
- [Feynman59] R. P. Feynman: „There’s plenty of room at the bottom“, *Journal of Micromechanical Systems*, **1**, 1 (1992)
- [Frommelt06] S. Frommelt: „Dielektrophoretische Ausrichtung von Kohlenstoff-Nanoröhren“, *Bachelorarbeit, Fakultät für Physik der Universität Augsburg* (2006)

- [Fuhr94] G. Fuhr, T. Schnelle, B. Wagner: „Travelling wave-driven microfabricated electrohydrodynamic pumps for liquids“, *Journal of Micro-mechanics and Microengineering*, **4** (1994)
- [Geschke04] O. Geschke, H. Klank, P. Telleman: „Microsystem Engineering of Lab-on-a-chip Devices“, *Wiley* (2004)
- [Gobby01] D. Gobby, P. Angeli, A. Gavriilidis: „Mixing characteristics of T-type microfluidic mixers“, *J. Micromech. Microeng.*, **11**, 126 (2001)
- [Gogel06] D. Gogel: „Akustisch getriebene Fluidik in offenen und geschlossenen Geometrien“, *Bachelorarbeit, Fakultät für Physik der Universität Augsburg* (2006)
- [Gong04] Jian Gong, Shih-Kang Fan, and Chang-Jin Kim: „Portable digital microfluidics platform with active but disposable lab-on-chip“ *Tech. Digest of 17th IEEE International Conference on Micro Electro Mechanical Systems (MEMS'04)* (2004)
- [Groissman01] A. Groissman, V. Steinberg: „Efficient mixing at low Reynolds numbers using polymer additives“, *Nature*, **401**, 905 (2001)
- [Guttenberg04] Z. Guttenberg, A. Rathgeber, S. Keller, J. O. Rädler, A. Wixforth, M. Kostur, M. Schindler, P. Talkner: „Flow profiling of a surface acoustic wave nanopump“, *Physics Review Letters E*, **70**, 5 (2004)
- [Guttenberg05] Z. Guttenberg, H. Mueller, H. Habermueller, A. Geisbauer, J. Pipper, J. Felbel, M. Kielpinski, J. Scriba, A. Wixforth: „Planar chip device for PCR and hybridization with surface acoustic wave pump“, *Lab on a Chip*, **5** (2005)
- [Hagen04] R. Hagen, R. Behrends, U. Kaatze: „Acoustical Properties of Aqueous Solutions of Urea: Reference Data for the Ultrasonic Spectrometry of Liquids“, *J. Chem. Eng. Data*, **49**, 4 (2004)
- [Hardt03] S. Hardt, F. Schönfeld: „Laminar mixing in different interdigital micromixers: II. Numerical simulations“, *AIChE Journal*, **49**, 3 (2003)
- [Hatch01] A. Hatch, A. E. Kamholz, G. Holman, P. Yager, K. F. Böhringer: „A ferrofluidic magnetic micropump“, *Journal of Microelectromechanical Systems*, **10**, 2 (2001)
- [Hessel03] V. Hessel, S. Hardt, H. Löwe, F. Schönfeld: „Laminar mixing in different interdigital micromixers: I. Experimental characterization“, *AIChE Journal*, **49**, 3 (2003)

- [Hörner05] A. L. Hörner: „Untersuchung von Metall-Isolator Übergängen mit Oberflächenwellen“, *Dissertation, Fakultät für Physik der Universität Augsburg* (2005)
- [Kaajakari01] V. Kaajakari, A. Sathaye, A. Lal: „A frequency addressable ultrasonic microfluidic actuator array“ *The 11th International Conference on Solid-State Sensors and Actuators* (2001)
- [Kaatze06] U. Kaatze: Persönliche Mitteilung Dr. Udo Kaatze, Georg-August-Universität Göttingen (2006)
- [Kaye95] G. W. C. Kaye, T. H. Laby: „Tables of Physical and chemical Constants, 16. Auflage“, *Longman* (1995)
- [Keller01] M. Keller, J. Schilling, E. Sackmann: „Oscillatory magnetic bead rheometer for complex fluid microrheometry“, *Review of Scientific Instruments*, **72** (2001)
- [Knight98] J. Knight, A. Vishwanath, J. Brody, R. Austin: „Hydrodynamic Focusing on a Silicon Chip Mixing Nanoliters in Microseconds“, *Physics Review Letters*, **80**, 3863 (1998)
- [Köster06A] D. Köster: „Numerical simulation of acoustic streaming on SAW-driven biochips“, *Dissertation, Fakultät für Mathematik der Universität Augsburg* (2006)
- [Köster06B] D. Köster: Persönliche Mitteilung Dr. Daniel Köster, Universität Augsburg (2006)
- [Krupenkin03] T. Krupenkin, S. Yang, P. Mach: „Tunable liquid microlens“, *Applied Physics Letters*, **82**, 3 (2003)
- [Kutschera03] H. J. Kutschera: „Lineare und nichtlineare akustophotoelektrische Wechselwirkung“, *Dissertation, Fakultät für Physik der Ludwig-Maximilian Universität München* (2003)
- [Langlotz04] M. Langlotz: „Parallelisierung eines Cache-optimalen 3D Finite-Element-Verfahrens“, *Diplomarbeit, Fakultät für Informatik der Technischen Universität München* (2004)
- [Laude04] V. Laude, M. Masson, S. Ballandras, M. Solal: „Imaginary branches of surface acoustic wave slowness curves“, *Journal of Applied Physics*, **96**, 11 (2004)
- [Lewis85] M. F. Lewis edited by E. A. Ash, E. G. S. Paige: „On Rayleigh waves and related propagating acoustic waves“, in: *Rayleigh-Wave Theory and Application*, Springer (1985)

- [Lide95] D. R. Lide (editor): „CRC Handbook of Chemistry and Physics, 76. Auflage“, *CRC-Press* (1996)
- [Lim03] H. S. Lim, J. D. Huang, V. L. Zhang, M. H. Kuok, S. C. Ng: „Evaluation of acoustic physical constants of LiNbO₃ at hypersonic frequencies“, *Journal of applied physics*, **93**, 12 (2003)
- [Lin01] T. H. Lin, S. H. Lee edited by K. K. Wong: „Thermal conductivity properties of LiNbO₃“, in: *Properties of Lithium niobate, EMIS No. 28, INSPEC* (2001)
- [Magnard06] Rémi Magnard: Persönliche Mitteilung Rémi Magnard, Comsol Support (2006)
- [Mathew05] G. Mathew, I. Mezić, L. Petzold: „A multiscale measure for mixing and its applications“, *Physica D*, **211**, 1-2 (2005)
- [Matthews77] H. Matthews: „Surface wave filters“, *Wiley* (1977)
- [Meleshko96] V.V. Meleshko, H. Aref: „A blinking rotlet model for chaotic advection“, *Physics of Fluids*, **8**, 3215 (1996)
- [Moore65] G. Moore: „What does the future hold“, *Electronics Australia*, **42**, 14 (1980)
- [Morgan03] H. Morgan, N. Green: „AC electrokinetics: colloids and nanoparticles“, *Research Studies Press* (2003)
- [Morgan85] D. P. Morgan edited by E. A. Ash, E. G. S. Paige: „Rayleigh Wave Transducers“, in: *Rayleigh-Wave Theory and Application, Springer* (1985)
- [Müller04] C. Müller: „Sensorische Anwendungen mit akustischen Oberflächenwellen“, *Dissertation, Fakultät für Physik der Ludwig-Maximilian Universität München* (2004)
- [Nguyen02] N.-T. Nguyen, S. T. Wereley: „Fundamentals and applications of microfluidics“, *Artech House* (2002)
- [Nguyen04] N.-T. Nguyen, Z. Wu: „Micromixers - a review“, *Journal of Micro-mechanics and Microengineering*, **15** (2005)
- [Nyborg65] W. L. Nyborg edited by W. P. Mason: „Acoustic streaming“, in: *Physical Acoustics 2B: Properties of polymers and nonlinear acoustics, Academic Press* (1965)
- [Oliner73] A. A. Oliner: „Acoustic surface waves“, *Springer* (1973)

- [Ottino04A] J. M. Ottino, S. Wiggins: „Designing optimal micromixers“, *Science*, **305**, 485 (2004)
- [Ottino04B] J. M. Ottino, S. Wiggins: „Introduction: mixing in microfluidics“, *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A*, **362**, 923 (2004)
- [Purcell77] E. M. Purcell: „Life at low Reynold’s number“, *American Journal of Physics*, **45**, 3 (1977)
- [Rathgeber00] A. Rathgeber: „Manipulation und Transport von Materie in fester und flüssiger Form mittels akustischer Oberflächenwellen“, *Diplomarbeit, Fakultät für Physik der Ludwig-Maximilian Universität München* (2000)
- [Rathgeber05] A. Rathgeber, M. Wassermeier, A. Wixforth: „Acoustic ‘distributed source’ mixing of smallest fluid volumes“, *Journal of ASTM International*, **2**, 6 (2005)
- [Rayleigh85] L. J. W. S. Rayleigh: „On waves propagated along the planar surface of an elastic solid“, *Proceedings of the London Mathematical Society*, **17**, 4 (1885)
- [Sachs97] L. Sachs: „Angewandte Statistik, 8. Auflage“, *Springer* (1997)
- [Schilling99] J. Schilling: „Entwicklung einer Echtzeit-Bildverarbeitungssoftware und digitaler Videoaufnahmetechnik zur quantitativen Mikorrheometrie von Aktin- Netzwerken“, *Diplomarbeit, Fakultät für Physik der Technischen Universität München* (1999)
- [Schindler06] M. Schindler: „Free-surface microflows and particle transport“, *Dissertation, Fakultät für Physik der Universität Augsburg* (2006)
- [Schrader01] W. Schrader, U. Kaatz: „Zwitterion Headgroup Orientation Correlation and Mobility and the Domain Structure of Membranes“, *J. Phys. Chem. B*, **105**, 26 (2001)
- [Slobodnik73] A. J. Slobodnik, E. D. Conway, R. T. Delmonico: „Microwave Acoustics Handbook, 2. Auflage“, *Air Force System Command, USAF* (1973)
- [Sritharan06] K. Sritharan, C. J. Strobl, M. F. Schneider, Z. Guttenberg, A. Wixforth: „Acoustic mixing at low Reynold’s numbers“, *Applied Physics Letters*, **88**, 5 (2006)
- [Steppich05] D. Steppich: „Kopplung von mechanischen und thermodynamischen Eigenschaften von Phospholipidmembranen in der Nähe von Phasenumwandlungen - Bedeutungen für Anwendungen und Biologie“, *Diplomarbeit, Fakultät für Physik der Universität Augsburg* (2005)

- [Stöcker98] H. Stöcker: „Taschenbuch der Physik, 3. Auflage“, *Harri Deutsch* (1998)
- [Streibl00] M. Streibl: „Statische und dynamische Potentialgitter auf Halbleiterheterostrukturen für optoelektronische Anwendungen“, *Dissertation, Fakultät für Physik der Ludwig-Maximilian Universität München* (2000)
- [Strobl01] C. J. Strobl: „Flüssigkeitstransport mit akustischen Wellen auf Kristalloberflächen“, *Diplomarbeit, Fakultät für Physik der Ludwig-Maximilian Universität München* (2001)
- [Strobl02] C. J. Strobl, A. Rathgeber, A. Wixforth, C. Gauer, J. Scriba: „Planar microfluidic processors“ *IEEE Ultrasonics Symposium* (2002)
- [Strobl04] C. J. Strobl, C. Schäflein, U. Beierlein, J. Ebbecke, A. Wixforth: „Carbon nanotube alignment by surface acoustic waves“, *Applied Physics Letters*, **85**, 8 (2004)
- [Strobl05] C. J. Strobl: „Mikro- und Nanofluidik auf piezoelektrischen Substraten“, *Dissertation, Fakultät für Physik der Ludwig-Maximilian Universität München* (2005)
- [Stroock02] A. D. Stroock, S. K. W. Dertinger, A. Ajdari, I. Mezić, H. A. Stone, G. M. Whitesides: „Chaotic mixer for microchannels“, *Science*, **295**, 647 (2002)
- [Tabeling05] P. Tabeling: „Introduction to Microfluidics“, *Oxford Press* (2005)
- [Takanaga02] I. Takanaga, J. Kushibiki: „A method of determining acoustical physical constants for piezoelectric materials by line-focus-beam acoustic microscopy“, *IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control*, **49**, 7 (2002)
- [Talkner06] P. Talkner: Persönliche Mitteilung Prof. Dr. Peter Talkner, Universität Augsburg (2006)
- [Tomeno01] I. Tomeno, S. Matsumura edited by K. K. Wong: „Dielectric constants of LiNbO_3 “, in: *Properties of Lithium niobate, EMIS No. 28, INSPEC* (2002)
- [vandenHeuvel72] A. P. van den Heuvel: „Use of rotated electrodes for amplitude weighting in interdigital surface-wave transducers“, *Applied Physics Letters*, **21**, 6 (1972)
- [Viktorov67] I. A. Viktorov: „Rayleigh and Lamb waves“, *Plenum* (1967)

- [Visintini90] G. Visintini: „Modellierung von Oberflächenwellenfiltern im Wellenvektorraum“, *VDI* (1990)
- [Vogel97] H. Vogel: „Gerthsen Physik, 19. Auflage“, *Springer* (1997)
- [Wang94] X. B. Wang, Y. Huang, F. F. Becker, P. R. C. Gascoyne: „A unified theory of dielectrophoresis and travelling wave dielectrophoresis“, *Journal of Physics D: Applied Physics*, **27** (1994)
- [Wang98] X.-B. Wang, J. Vykoukal, F. F. Becker, P. R. C. Gascoyne: „Separation of Polystyrene Microbeads Using Dielectrophoretic/ Gravitational Field-Flow-Fractionation“, *Biophysical Journal*, **74**, 2689 (1998)
- [White65] R. M. White, F. W. Voltmer: „Direct piezoelectric coupling to surface elastic waves“, *Applied Physics Letters*, **7**, 12 (1965)
- [Wiggins04] S. Wiggins, J. M. Ottino: „Foundations of chaotic mixing“, *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A*, **362**, 937 (2004)
- [Wixforth02] A. Wixforth, C. Gauer, J. Scriba, M. Wassermeier and R. Kirchner: „Flatland Fluidics“, *mstnews*, **5** (2002)
- [Wixforth04A] A. Wixforth, C. Strobl, C. Gauer, A. Toegl, J. Scriba, Z. Guttenberg: „Acoustic manipulation of small droplets“, *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, **379**, 7-8 (2004)
- [Wixforth04B] A. Wixforth: „Acoustically driven planar microfluidics“, *Superlattices and Microstructures*, **33** (2004)
- [Wong02] K. K. Wong (editor): „Properties of Lithium niobate, EMIS No. 28“, *INSPEC* (2002)
- [Wu05] Z. Wu, N.-T. Nguyen: „Rapid mixing using twophase hydraulic focusing in microchannels“, *Biomedical Microdevices*, **7:1**, 13 (2005)
- [Yang99] J. Yang, Y. Huang, X.-B. Wang, F. F. Becker, P. R. C. Gascoyne: „Cell separation on microfabricated electrodes using dielectrophoretic/gravitational field-flow fractionation“, *Analytical Chemistry*, **71**, 5 (1999)

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich Prof. Dr. Achim Wixforth danken, dass er mir die Möglichkeit gab, im Bereich SAW-Mikrofluidik zu arbeiten. Ich habe den engen Informationsaustausch, die freundliche und offene Stimmung sowie die mir gewährten Freiheiten in der Verfolgung meiner Forschungen stets sehr genossen. Insbesondere hat es mich erfreut, dass meine Exkurse in die Theorie und Simulation immer ein offenes Ohr fanden und aktiv gefördert wurden. Darüber hinaus bedanke ich mich bei Prof. Dr. Thilo Kopp für die Erstellung des Zweitgutachtens und Prof. Dr. Karin Jacobs für die Drittbegutachtung.

Den Mitarbeitern am Lehrstuhl Experimentalphysik I gilt mein Dank für ihre Unterstützung. Dabei möchte ich besonders meinen Bürokollegen Dr. Andreas Hörner hervorheben, der stets für Diskussionen Zeit hatte und mir so manche Maske im Elektronenstrahlschreiber herstellte. Weiterhin möchte ich speziell Jürgen Neumann und Daniel Steppich für unsere gemeinsamen Experimente Dank zollen. Unserer Technikabteilung um Andreas Spörhase bin ich verbunden, weil ohne ihre Anlagenwartung und technische Beratung unsere Forschung nicht möglich wäre.

Die Kollegen vom Lehrstuhl Theoretische Physik I durfte ich immer mit Fragen zu Acoustic Streaming quälen. Ich möchte hierfür Prof. Dr. Peter Talkner, Dr. Michael Schindler und Dr. Marcin Kostur danken. Letzterer eröffnete mir mit seinen Simulationen zur chaotischen Advektion ein ganzes Teilgebiet dieser Arbeit und zeigte immer viel Interesse an meinen Experimenten. Beim Lehrstuhl Angewandte Mathematik I möchte ich Dr. Daniel Köster für die Erklärungen seiner Simulation des Acoustic Streaming mit der kompressiblen Navier-Stokes-Gleichung und unsere Zusammenarbeit bei der experimentellen Verifizierung seiner Simulationen danken. Zudem sei den ehemaligen Kollegen für ihre Hilfe gedankt: Von Tobias Bartusch habe ich viel über die Elektrotechnik in allen Frequenzbereichen gelernt und mit ihm einige Komponenten dieser Arbeit entwickelt. Meinem Vorgänger Dr. Christoph Strobl danke ich für all die Hilfe, die er mir zukommen ließ. Meinen beiden Bachelor-Studenten Daniel Gogel und Sebastian Frommelt danke ich für ihre sehr gute Arbeit und die schönen gemeinsamen Ergebnisse. Gleichwohl möchte ich meiner ehemaligen FPB-Studentin Melanie Wenzel-Schäfer für ihre Vorarbeiten zur Mischung mit chaotischer Advektion danken. Die Einrichtung des Simulationsrechners mit Linux übernahm dankenswerterweise Christoph Würstle.

Mein besonderer Dank gilt Dr. Werner Ruile von der Firma EPCOS, den ich gerade in

den letzten Monaten immer wieder zu SAW im allgemeinen und der Berechnung der Schallpfad-Profile im speziellen befragen durfte. Klaus Wiedenmann vom Lehrstuhl Experimentalphysik VI sei für die Laue-Aufnahmen meiner Wafer gedankt. Der Firma Weinhold möchte ich für die Bearbeitung des Cantilever-Pin-Probenhalters genauso danken wie der Alten Silberschmiede, welche die Cantilever-Pins kostenlos vergoldete. Bei der Firma HUND möchte mich für die optische Justierung der Filterwürfel des Mikroskops nach meinen Umbauten bedanken. Der Firma Advantix danke ich für die Prozessierung der vordefinierten Substrate. Unseren Werkstätten danke ich für die gefertigten Gerätschaften, dabei im besonderen Maße Bernd Hettenkofer und Horst Leitenmaier. Diese Arbeit wurde im Rahmen des Projekts B13 im SFB 486 „Manipulation von Materie auf der Nanometerskala“ durch die Deutschen Forschungsgemeinschaft unterstützt.

Abschließend möchte ich den Menschen danken, die mich auf meinem Weg durch die Promotion außerhalb der Universität begleitet haben. Meine Eltern Monika und Wilhelm, mein Bruder Sebastian und meine Freundin Simone waren immer Rückhalt, Hilfe und Freude für mich. Gerade in den letzten hektischen Monaten hat Simone mich tatkräftig unterstützt und die Arbeit Korrektur gelesen.

Lebenslauf

Name: Thomas Frommelt
Geburtsdatum: 1. Februar 1978
Geburtsort: Augsburg
Familienstand: ledig
Eltern: Monika Frommelt, geb. Wolff (Hausfrau)
Wilhelm Frommelt (Netzwerkadministrator)
Geschwister: Sebastian Frommelt

Schul Ausbildung

Sept. 1984 - Juli 1988 Besuch der Volksschule Westendorf
Sept. 1988 - Juni 1997 Besuch des Gymnasiums in Wertingen

Wehrdienst

Nov. 1997 - Dez. 1997 Grundausbildung, 4. Kompanie/Gebirgspionierbataillon 8
Jan. 1998 - Sep. 1998 Wehrdienst, 3. Kompanie/Gebirgspionierbataillon 8

Studium

Nov. 1998 - Nov. 2003 Studium der Physik an der Universität Augsburg
Nebenfach: Informatik
Dez. 2002 - Nov. 2003 Diplomarbeit am Lehrstuhl für Experimentalphysik IV
der Universität Augsburg mit dem Thema:
„Der Plasmajet als dielektrische Barrierenentladung
und Beschichtungsanlage“
seit Dez. 2003 Wissenschaftlicher Angestellter am Lehrstuhl für
Experimentalphysik I der Universität Augsburg